



FACULTAD DE CIENCIAS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA TEÓRICA

Contenido molecular en la región de fotodisociación de la Barra de Orión

Memoria para acceder al grado de Doctor realizada por:

Sara Cuadrado Prado



CENTRO DE ASTROBIOLOGÍA
ASOCIADO AL NASA ASTROBIOLOGY INSTITUTE



CSIC



Directores:

Dr. Javier R. Goicoechea

Prof. José Cernicharo Quintanilla

Grupo de Astrofísica Molecular (ICMM – CSIC)

Tutor: **Yago Ascasibar Sequeiros** (UAM)

Resumen

Las regiones de fotodisociación (PDRs, *Photodissociation Regions*), son las zonas de transición entre el gas caliente atómico e ionizado iluminado por campos de radiación UV, y el gas frío y neutro (moléculas en su mayoría) protegido de la radiación. En estas regiones, la radiación FUV incidente (fotones con energías entre $6\text{ eV} < h\nu < 13.6\text{ eV}$ emitidos por estrellas masivas tipo O y B) condiciona fuertemente el estado fisicoquímico del gas y del polvo. Las PDRs son extremadamente importantes para la comprensión del medio interestelar y circunestelar ya que en ellas tiene lugar la transición entre el gas atómico y molecular (transiciones H/H_2 y $\text{C}^+/\text{C}/\text{CO}$). Con esta definición general, las PDRs representan hasta un 90% del gas neutro de una galaxia e incluyen objetos como las nubes difusas interestelares, las interfases entre las regiones HII y las nubes moleculares densas, las nebulosas planetarias alrededor de estrellas evolucionadas, etc. Todos estos ambientes presentan una química particular inducida por una activa fotoquímica, y comparten características comunes en el sentido de que su física (cinemática, termodinámica) y su química (disociación e ionización del gas, fotoprocesamiento del polvo) están determinadas por la presencia de radiación FUV.

En las regiones de formación de estrellas masivas, las PDRs trazan la transición entre el gas caliente ionizado por el intenso campo UV estelar (las regiones HII) y el gas frío de la nube molecular parental. Los procesos físicos y químicos que tienen lugar en las PDRs permiten estudiar la interacción de las estrellas masivas con el medio que las rodea, y por lo tanto, son necesarios para comprender la evolución del medio interestelar de nuestra galaxia y de los objetos más distantes. El Complejo de Orión alberga la región de formación de estrellas masivas más cercana ($\sim 414\text{ pc}$), y es la región más apropiada para estudiar, en alta resolución espacial, los efectos de la radiación FUV sobre el medio interestelar circundante. La PDR conocida como la Barra de Orión es la interfase entre la nube molecular OMC-1 (el emplazamiento de una de las regiones de formación de estrellas masivas más estudiadas de la galaxia) y la región HII que forma el cúmulo del Trapecio. Las estrellas del Trapecio iluminan la Barra de Orión con un campo de radiación FUV aproximadamente 10 000 veces mayor que el campo interestelar medio, proporcionando a la región unas propiedades físicas y químicas características y convirtiéndola en un excelente laboratorio para investigar y establecer los límites de la complejidad química en entornos irradiados. La Barra de Orión es un referente para la comprensión de la emisión molecular de otras PDRs mucho más lejanas y tenues (como las galaxias con brotes de formación estelar) o no resueltas espacialmente (como los discos protoplanetarios irradiados, conocidos como *proplyds*).

En esta tesis doctoral se presenta un estudio detallado de la Barra de Orión con el principal objetivo de establecer las condiciones físicoquímicas, el contenido molecular y los procesos químicos dominantes en PDRs altamente irradiadas. Para ello se ha realizado, analizado e interpretado el primer barrido espectral a 3 mm (80 – 118 GHz), 2 mm (128 – 176 GHz), 1 mm (202 – 305 GHz) y 0.8 mm (328 – 359 GHz) del frente de disociación de la Barra de Orión (i.e. el borde irradiado y caliente de la PDR) utilizando el radiotelescopio IRAM-30m. Se han identificado más de 850 líneas pertenecientes a las transiciones rotacionales de ~ 60 especies moleculares con hasta siete átomos, de las cuales destacan los iones reactivos (SH^+ , HOC^+ , CO^+ , SO^+ y CF^+), hidrocarburos (C_2H , $\text{l-C}_3\text{H}$, $\text{l-C}_3\text{H}^+$, $\text{c-C}_3\text{H}$, C_4H , $\text{c-C}_3\text{H}_2$ y $\text{l-H}_2\text{C}_3$) y moléculas orgánicas complejas (e.g. CH_3OH , CH_3CN y CH_3COH) que muestran la riqueza química de la región. También se han detectado isotopómeros (e.g. ^{13}CCH y C^{13}CH), isómeros estructurales (HCN/HNC y $\text{HCO}^+/\text{HOC}^+$) y confórmeros (cis y trans- HCOOH). Además, se han realizado cartografiados de líneas rotacionales excitadas a 0.8 mm con una resolución angular de $\sim 7''$, también con el radiotelescopio IRAM-30m, con el objetivo de situar la posición observada del frente de disociación en el contexto de la emisión a gran escala de la Barra y estudiar la estratificación química. Mediante observaciones realizadas con el interferómetro ALMA se han obtenido las primeras imágenes espectrales en alta resolución angular ($\sim 1''$) para estudiar la morfología y actividad en el borde iluminado de la Barra de Orión.

Los principales resultados de esta tesis incluyen: (i) La primera detección de líneas de emisión del ion reactivo SH^+ desde un observatorio terrestre (con observaciones de IRAM-30m y ALMA) y la corrección de las frecuencias de línea y de sus constantes espectroscópicas (Müller et al. 2014, A&A). (ii) El estudio detallado de la abundancia, distribución espacial y condiciones de excitación de hidrocarburos (Cuadrado et al. 2015, A&A) y moléculas orgánicas complejas (Cuadrado et al. 2017, A&A), revelando el grado de complejidad alcanzado en una región irradiada por campos de radiación FUV intensos. (iii) La detección de una nueva especie en el medio interestelar, el confórmero cis- HCOOH , y la interpretación de su proceso de formación como un mecanismo de fotoisomerización (Cuadrado et al. 2016, A&A). (iv) La obtención de las primeras imágenes en alta resolución angular de la emisión de los iones reactivos SH^+ , HOC^+ y SO^+ en el medio interestelar (utilizando el interferómetro ACA–ALMA). Se ha estudiado detalladamente la abundancia, distribución espacial y procesos de formación/destrucción y excitación de estas especies en la Barra de Orión. En particular, las imágenes resuelven un estrecho filamento de emisión de SH^+ y HOC^+ en el borde de la región de fotodisociación delineando la emisión de H_2^* (Goicoechea, Cuadrado et al. 2017, A&A). (v) La obtención de las primeras imágenes espectrales con el interferómetro ALMA de la Barra de Orión con una resolución angular de $\sim 1''$ (Goicoechea, Pety, Cuadrado et al. 2016, Nature). Las imágenes revelan subestructuras de alta densidad, inestabilidades y flujos de gas que se fotoevaporan en el extremo irradiado de la nube molecular. Las zonas de transición H/H_2 y $\text{C}^+/\text{C}/\text{CO}$ están mucho más cerca entre sí que las predicciones de los modelos de PDR estacionarios que han estado vigentes los últimos 30 años. Los resultados sugieren que el borde de la nube ha sido comprimido por una onda de alta presión que se está moviendo hacia la nube molecular, demostrando que los efectos dinámicos y de no equilibrio son importantes para la evolución de la nube.

Índice

i. Resumen	1
ii. Índice	3
iii. Prefacio	7
I Introducción	11
1. Medio Interestelar	13
1.1. Introducción	13
1.2. Gas y polvo en el Medio Interestelar	14
1.3. Objetos interestelares	15
1.4. Intercambios de Energía en el Medio Interestelar	17
1.4.1. Fuentes de energía en el Medio Interestelar	17
1.4.2. Procesos de calentamiento del gas	18
1.4.2.1. Calentamiento por efecto fotoeléctrico	19
1.4.2.2. Calentamiento por fotoionización de átomos	22
1.4.2.3. Calentamiento por desexcitación colisional y fotodisociación de H_2	23
1.4.2.4. Calentamiento por reacciones químicas	24
1.4.2.5. Calentamiento por colisiones entre gas - polvo	25
1.4.2.6. Calentamiento por rayos cósmicos	25
1.4.2.7. Calentamiento por rayos X	25
1.4.2.8. Procesos macroscópicos de calentamiento	26
1.4.3. Procesos de enfriamiento del gas	26
1.4.3.1. Enfriamiento por líneas de estructura fina	27
1.4.3.2. Enfriamiento a través de transiciones rotacionales de moléculas	28
2. La región de Orión	29
2.1. Introducción	29
2.2. Componente estelar de la región de Orión	29
2.3. Medio Interestelar de la región de Orión	32
2.4. Interacción de la radiación FUV con la materia	36

3. Regiones de fotodisociación	39
3.1. Presentación general	39
3.2. Estructura de las PDRs	40
3.3. Observaciones y modelos teóricos	42
3.4. Procesos físicos en PDRs	43
3.4.1. Radiación FUV incidente	43
3.4.1.1. Fuentes de opacidad dentro de una PDR	43
3.4.1.2. Parámetro G_0/n	44
3.4.2. Equilibrio térmico	45
3.5. Procesos químicos en las PDRs	47
3.5.1. Química de PDRs en fase gas	48
3.5.2. Química en la superficie de los granos de polvo	50
4. Herramientas para el análisis de datos	53
4.1. Diagramas de Rotación	53
4.2. Código de transferencia radiativa MADEx	54
4.3. Modelado químico con el código de PDR Meudon	55
II Resultados: Contenido molecular de la Barra de Orión	57
5. Observaciones milimétricas de la Barra de Orión	59
5.1. La Barra de Orión	59
5.2. Barrido espectral de la Barra de Orión con IRAM-30m	62
5.2.1. Importancia de los barridos espectrales	62
5.2.2. Observaciones	62
5.2.3. Proceso de reducción de datos	66
5.2.4. Identificación de líneas	67
5.2.5. Resultados	68
5.3. Cartografiado de la Barra de Orión con IRAM-30m	94
5.3.1. Observaciones y Reducción de datos	94
5.3.2. Estratificación química	98
6. Moléculas simples	101
6.1. Análisis	101
6.1.1. Ajuste de los parámetros de línea	101
6.1.2. Diagramas de rotación	102
6.1.3. Abundancias	108
6.2. Perfiles de línea	108
6.3. Parámetros espectroscópicos y observacionales	113

7. Hidrocarburos	125
7.1. Hidrocarburos en el medio interestelar	125
7.2. Análisis y principales resultados	126
7.3. Cuadrado et al. 2015 (A&A)	129
8. Moléculas orgánicas complejas	161
8.1. COMs en el medio interestelar	161
8.2. Análisis y principales resultados	162
8.3. Cuadrado et al. 2017 (A&A)	167
9. Fotoisomerización del Ácido Fórmico	197
9.1. Ácido Fórmico	197
9.2. Análisis y principales resultados	198
9.3. Cuadrado et al. 2016 (A&A)	201
10. Iones Reactivos	211
10.1. Iones Reactivos en el Medio Interestelar	211
10.2. Observaciones de CO^+ y CF^+ en la Barra de Orión	212
10.3. Müller et al. 2014 (A&A)	214
10.4. Goicoechea, Cuadrado et al. 2017 (A&A)	221
10.5. Perfiles de línea de los iones reactivos	234
10.6. Parámetros espectroscópicos y observacionales de los iones reactivos	235
11. Líneas de recombinación	237
11.1. Formación de las líneas de recombinación	237
11.2. Líneas de recombinación en la Barra de Orión	238
11.3. Parámetros de línea	239
11.4. Perfiles de línea	242
12. Estructura de la Barra de Orión a alta resolución angular	243
12.1. Observaciones con ALMA	243
12.2. Resultados	243
12.3. Goicoechea, Pety, Cuadrado et al. 2016 (Nature)	245
13. Resumen general y conclusiones	257
III Apéndices	265
A. Espectroscopía Rotacional	267
A.1. Presentación general	267
A.2. Moléculas diatómicas y poliatómicas lineales	268
A.3. Moléculas trompo-simétricas	269

A.4. Moléculas trompo-asimétricas	270
B. Líneas detectadas en el barrido espectral de la Barra de Orión	273
C. Artículos de Divulgación y Notas de Prensa	297
C.1. Barra libre de hidrocarburos en Orión	297
C.2. Primera imagen en alta resolución del borde de la nube molecular de Orión	301
C.3. Violent emissions of newborn stars	305
C.4. Ácido fórmico entre las estrellas	307
iv. Contribución Personal	309
v. Lista de Publicaciones	313
vi. Lista de Acrónimos	315
vii. Índice de Figuras	317
viii. Índice de Tablas	321
ix. Bibliografía	323

Prefacio

Esta tesis doctoral se centra en el estudio de la emisión molecular en el dominio (sub)milimétrico de la región de fotodisociación asociada a la Barra de Orión. Los fotones en el ultravioleta lejano (FUV, *Far-UV*; $6\text{ eV} < h\nu < 13.6\text{ eV}$) emitidos por estrellas masivas de tipo OB influyen notablemente en la dinámica, ionización, calentamiento y química del medio interestelar neutro (hidrógeno atómico no ionizado). En estos entornos, conocidos genéricamente como regiones de fotodisociación (PDRs, *PhotoDissociation Regions*), las propiedades del gas y polvo están determinadas por la presencia de fotones FUV. Las regiones de fotodisociación se encuentran en muchos entornos astrofísicos y a muchas escalas espaciales, como por ejemplo: las regiones cercanas a estrellas masivas tipo OB, las zonas superficiales de las nubes moleculares que están siendo irradiadas por el campo UV interestelar, las nebulosas planetarias, los núcleos de galaxias con brotes de formación estelar, las superficies iluminadas de los discos protoplanetarios, y las nubes del medio interestelar difuso. Todas ellas comparten procesos físicoquímicos similares.

En las regiones de formación de estrellas masivas (estrellas tipo O y B con masas $>8 M_{\odot}$), las PDRs trazan la transición entre el gas caliente ionizado por el campo UV estelar (las regiones HII), y el gas frío de la nube molecular parental. A medida que la extinción visual y la columna de densidad aumentan hacia el interior de la PDR, la intensidad del campo de radiación, la ionización y temperatura disminuyen dando lugar a la estratificación química observada (transiciones H/H₂ y C⁺/C/CO). En estas regiones, el intenso flujo de fotones FUV que incide sobre el borde de la nube determina la física (cinemática y termodinámica) y la química subyacente (disociación e ionización del gas, fotoprocesamiento del polvo, y efectos de la presencia de H₂ vibracionalmente excitado). Estos procesos físicos y químicos que ocurren en las PDRs permiten estudiar la interacción entre las estrellas masivas que generan las regiones HII con el medio que las rodea, y por lo tanto, son necesarios para comprender la evolución del medio interestelar de nuestra galaxia y de los objetos más distantes.

En las últimas décadas, la propagación de fotones FUV (absorción y dispersión) y los mecanismos de calentamiento (e.g. efecto fotoeléctrico) y enfriamiento en PDRs (e.g. mediante la emisión ro-vibracional de H₂ en el infrarrojo y la emisión de líneas de estructura fina de C⁺ y O en el infrarrojo lejano) han sido tratados en profundidad desde un punto de vista teórico y observacional. Otros aspectos como: (i) el contenido molecular en regiones fuertemente irradiadas, (ii) la distribución espacial de diferentes especies químicas en función de la atenuación del campo FUV, y (iii) la estructura fundamental y morfología de estas regiones a pequeñas escalas espaciales, han

sido mucho menos estudiados y por tanto son menos comprendidos. De estos puntos surge precisamente la **motivación de esta tesis doctoral**. El desarrollo e instalación de receptores heterodinos más sensibles y de banda más ancha en el radiotelescopio de 30 m de IRAM (llegando incluso al dominio submilimétrico), así como la puesta en marcha del interferómetro (sub)milimétrico ALMA en Chile, ha permitido por primera vez proponer un trabajo de investigación que abordase estos aspectos menos conocidos de la interacción entre la radiación FUV y las nubes moleculares cercanas a estrellas masivas jóvenes.

El Complejo de Orión alberga la región de formación de estrellas masivas más cercana (~ 414 pc), por ello es la región más apropiada para estudiar, en alta resolución espacial, los efectos de la radiación FUV procedentes de estrellas masivas OB sobre la nube molecular parental. Las estrellas masivas del Trapecio han creado una región HII que, en su extremo más alejado, está confinada por la nube molecular OMC-1. Una de las interfases entre la región HII y OMC-1 es una región de fotodisociación conocida como la Barra de Orión. En el borde de la Barra, el campo de radiación FUV es unas 10 000 veces más intenso que en una nube interestelar difusa típica de la vecindad solar. Debido a su cercanía, la intensa emisión en casi todas las longitudes de onda, y la ventajosa geometría en el plano del cielo ("de canto"), la Barra de Orión es un objeto ideal para determinar y comprender las condiciones físicas (temperatura, densidad, etc.) y propiedades químicas de un medio irradiado: contenido molecular, reacciones químicas dominantes y distribución espacial de cada especie. De hecho la Barra es el arquetipo de este tipo de objetos en la Vía Láctea.

Con estos argumentos, se comenzó un barrido espectral de la Barra utilizando los nuevos receptores EMIR instalados en el radiotelescopio IRAM-30m. Las primeras observaciones mostraban un número sorprendente de líneas de emisión moleculares en una región con unas condiciones aparentemente tan severas y extremas para el desarrollo de una química compleja. Con anterioridad, Hogerheijde et al. (1995) observaron 53 líneas con los telescopios JCMT, CSO e IRAM-30m en varias frecuencias en el rango milimétrico y submilimétrico. Más recientemente, Leurini et al. (2006) utilizaron el telescopio de 12 m APEX para estudiar la emisión molecular en el rango de frecuencias de 279 – 307 GHz en la dirección a una condensación densa tras el frente de disociación. Estos autores presentan la detección de ~ 40 líneas, incluyendo alguna molécula orgánica simple como H_2CO o CH_3OH . Sin embargo, hasta la instalación de los receptores EMIR en IRAM-30m, no se había llevado a cabo un barrido espectral completo de ninguna PDR iluminada con un campo de radiación FUV intenso. Recientemente también se ha realizado un barrido espectral con Herschel/HIFI en el dominio submilimétrico e infrarrojo lejano (entre 480 – 1250 GHz y 1410 – 1910 GHz; Nagy et al. 2017). A estas frecuencias más altas se accede básicamente a la emisión de líneas rotacionales excitadas de CO y a la emisión de hidruros sencillos (H_2O , OH, CH^+ , HF, etc.) que no pueden observarse desde Tierra. En total se detectaron 120 líneas de emisión.

Los **objetivos de investigación** de esta tesis doctoral son establecer las condiciones fisicoquímicas, el contenido molecular y la química dominante en regiones de fotodisociación altamente irradiadas. Esta tesis se centra en la Barra de Orión, probablemente el mejor referente para comprender la emisión molecular de otras regiones de fotodisociación mucho más lejanas y tenues (e.g. las galaxias con brotes de formación estelar) o no resueltas espacialmente (e.g. los *proplyds*).

Para ello se han realizado, analizado e interpretado: (i) el primer barrido espectral a 3 mm, 2 mm, 1 mm y 0.8 mm de la Barra de Orión utilizando el radiotelescopio IRAM-30m; (ii) cartografiados de líneas rotacionales excitadas a 0.8 mm con una resolución angular de $\sim 7''$ con el radiotelescopio IRAM-30m; y (iii) las primeras imágenes espectrales en alta resolución angular ($\sim 1''$) con el interferómetro ALMA para estudiar la morfología y actividad en el borde iluminado de la Barra. La interpretación de estas observaciones se ha realizado utilizando catálogos de espectroscopía molecular, modelos de excitación no-LTE y de transferencia de radiación en líneas moleculares desarrollados por el grupo de Astrofísica Molecular (ICMM–CSIC), así como el modelo de PDRs Meudon para interpretar los procesos químicos en fase gas y el balance de energía de las regiones de fotodisociación.

Esta tesis se presenta como compendio de publicaciones (seis en total, incluidas en los Capítulos 7, 8, 9, 10 y 12). Estos artículos científicos, publicados en las revistas con sistema de arbitraje A&A y Nature, son la mejor prueba de todo el trabajo realizado a lo largo de esta tesis doctoral. Se ha estructurado en tres partes principales:

■ **Parte I:** Consiste en una introducción que explica el contexto de la investigación desarrollada en esta tesis doctoral. En el Capítulo 1 se describen las componentes del medio interestelar (gas y polvo), y los principales procesos de intercambio de energía (calentamiento y enfriamiento del gas interestelar). En el Capítulo 2 se da una visión general de la región de Orión por ser el emplazamiento de una de las regiones de formación de estrellas masivas más importante y cercana de la Galaxia y por albergar la región objeto de estudio, la Barra de Orión. En el Capítulo 3 se realiza una introducción a las regiones de fotodisociación y a los procesos físicos y químicos que tienen lugar en estas regiones. En el Capítulo 4 se describen las herramientas empleadas en el análisis de los datos (el código de transferencia radiativa MADEX, el código fotoquímico de PDRs Meudon y la técnica de los diagramas rotacionales empleada en el análisis de datos).

■ **Parte II:** Se muestran los resultados alcanzados a lo largo de esta tesis sobre la caracterización química y física de la región de fotodisociación de la Barra de Orión. En el Capítulo 5 es una introducción general a los trabajos compendiados, donde se presenta la región de estudio, se muestran los resultados generales y se explica como se han llevado a cabo las observaciones, el proceso de reducción y la identificación de las líneas detectadas en el barrido espectral. También se presentan los cartografiados de las líneas rotacionales excitadas observados con IRAM-30m y el estudio de la estratificación química observada en la Barra. Los resultados obtenidos en el barrido espectral se tratan en detalle en los Capítulos 6 – 9 y 11: en el Capítulo 6 se muestran los resultados del análisis de la emisión de las moléculas simples (e.g. CS, SO₂, CN, HCN, HNC, OCS, H₂S); en el Capítulo 7 se analiza la abundancia, condiciones de excitación, química y distribución espacial de los hidrocarburos; en el Capítulo 8 se analiza la abundancia, condiciones de excitación, posibles mecanismos de formación y distribución espacial de las moléculas orgánicas complejas (e.g. CH₃OH, CH₃CN, CH₃CHO) y sus especies precursoras (e.g. HCO, H₂CO); en el Capítulo 9 se presenta la primera detección del confórmero cis-HCOOH en el medio interestelar y su proceso de formación mediante el mecanismo de fotoisomerización (trabajo realizado en colaboración con fisicoquímicos teóricos del IFF y UAM); y en el Capítulo 11 se muestran las líneas de recombinación de H, He y C detectadas en el barrido espectral. La investigación relacionada con los cartografiados realizados en alta resolución angular ($\sim 1''$) con ALMA se exponen en los

Capítulos 10 y 12: en el Capítulo 10 se presenta la primera detección de líneas de emisión del ion reactivo SH^+ desde un observatorio terrestre (con las observaciones de IRAM-30m y ALMA) y la corrección de las frecuencias de línea y de sus constantes espectroscópicas en colaboración con la Universidad de Colonia. En este Capítulo también se muestran y analizan las primeras imágenes en alta resolución angular de la emisión de los iones reactivos SH^+ , HOC^+ y SO^+ en el medio interestelar (utilizando el interferómetro ACA–ALMA). En el Capítulo 12 se presentan las primeras imágenes espectrales con el interferómetro ALMA de la Barra de Orión y se lleva a cabo el estudio de la dinámica y morfología del borde iluminado de la nube de Orión. Finalmente en el Capítulo 13 se presentan las conclusiones finales y el resumen de toda la investigación realizada en esta tesis doctoral.

■ **Parte III:** Se incluye el material complementario: una introducción a la espectroscopía rotacional, una tabla con todas las líneas detectadas en el barrido espectral y los artículos de divulgación y notas de prensa basados en el trabajo aquí presentado.

Parte I

Introducción

Capítulo 1

Medio Interestelar

1.1. Introducción

La Vía Láctea alberga alrededor de $(2 - 4) \times 10^{11}$ estrellas, las cuales contienen el $\sim 90\%$ de la masa bariónica total de la Galaxia. El espacio entre las estrellas se conoce como Medio Interestelar (ISM, *InterStellar Medium*), y contiene materia ordinaria (gas y polvo; ver Sección 1.2) y energía (radiación estelar, campos magnéticos, choques o explosiones, etc.; ver Sección 1.4). La materia interestelar sólo representa entre el 10% y 15% de la masa total de nuestra Galaxia, y tiende a concentrarse cerca del plano galáctico y a lo largo de los brazos espirales.

La composición química del medio interestelar es el resultado de la nucleosíntesis y del enriquecimiento químico debido a la evolución estelar: está formado por un $\sim 90\%$ de hidrógeno, $\sim 10\%$ de helio, y sólo 0.1% de otros elementos pesados (C, Si, Fe, O, S, Mg, etc.; Spitzer, 1978). Una pequeña fracción en masa de esta materia ($\sim 1\%$) está en forma de partículas sólidas: granos de polvo con tamaños del orden de nm y μm que pueden estar recubiertos por mantos de hielo en las regiones más frías. El resto del material está en fase gas, clasificado en diferentes fases en función del estado en el que se encuentre el hidrógeno (molecular (H_2), atómico (HI) e ionizado (HII)), y de la temperatura y densidad de la materia.

El medio interestelar forma parte integral del ciclo vital de las estrellas (Fig. 1.1): a lo largo de su evolución y muer-

te, las estrellas alimentan y enriquecen el medio interestelar con materia (polvo y gas), ya sea de manera continua a través de potentes vientos estelares, o de forma instantánea a través de explosiones de supernova (explosiones estelares violentas resultado de una inestabilidad termonuclear o del repentino colapso gravitacional del núcleo de algunas estrellas al final de su vida). La materia eyectada se condensa formando nubes difusas que evolucionan a nubes translúcidas y moleculares a medida que la densidad aumenta y disminuye la temperatura, pasando de hidrógeno atómico a molecular. Las nubes moleculares densas son las regiones donde ocurre la formación estelar, donde el gas interestelar se compacta debido a las fuerzas gravitatorias formando protoestrellas. Estas estrellas jóvenes están rodeadas de los restos de las nubes moleculares de las que se formaron y, en una etapa posterior, por un disco protoplanetario que al evolucionar formará un nuevo sistema estelar con planetas, asteroides, cometas y otros cuerpos. La muerte de la estrella cierra el ciclo, enriqueciendo el medio interestelar con productos de la fusión nuclear y determinando la evolución química de las galaxias. La inyección de masa estelar en el medio interestelar se acompaña de una fuerte liberación de energía que, además de generar movimientos turbulentos, contribuye a mantener su estructura altamente heterogénea y puede, en determinadas circunstancias, generar nuevas regiones moleculares propensas a la formación estelar.

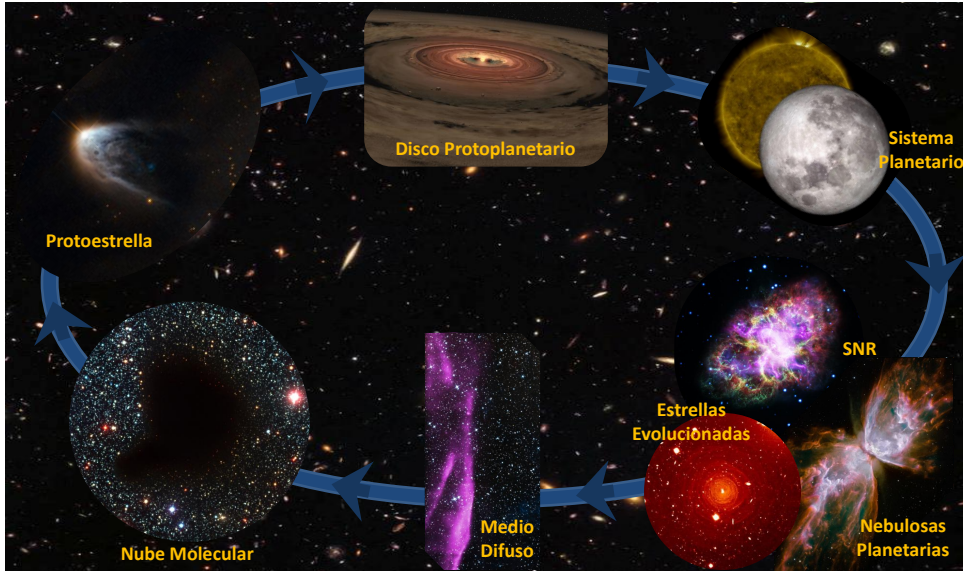


Figura 1.1: Representación del ciclo vital del medio interestelar, desde la inserción de materia al medio debido a la pérdida de masa estelar, hasta la formación de un sistema planetario. Créditos: Composición de imágenes obtenidas de www.nasa.gov. Imagen de IRC+10216: Izan Leao (VLT). Imagen de fondo: ESA/Hubble & Nasa.

1.2. Gas y polvo en el Medio Interestelar

El medio interestelar es un medio extremadamente heterogéneo que abarca varios entornos expuestos a diferentes condiciones. Aproximadamente la mitad de la masa interestelar está confinada en nubes de tres tipos que ocupan sólo el $\sim 1 - 2\%$ del volumen interestelar: **(i) Las nubes oscuras** están compuestas principalmente por gas molecular muy frío ($T \simeq 10 - 20$ K), con densidades típicas de $n \simeq 10^2 - 10^6 \text{ cm}^{-3}$. Estas regiones se trazan habitualmente a través de la emisión en líneas rotacionales de CO y otras moléculas polares. Debido a la extinción por los granos de polvo, estas regiones bloquean la radiación visible de las estrellas que se encuentran detrás de la nube, y por ello, las nubes moleculares densas aparecen como zonas oscuras en las imágenes ópticas. Las **nubes moleculares calientes** también están compuestas por gas molecular pero a mayor temperatura ($T \simeq 100 - 300$ K). Están asociadas generalmente a la presencia de una protoestrella o estrella joven. Debido a la gran concentración de materia (gas y polvo), en estas regiones existe una gran diversidad química, desde H_2 y CO (las moléculas más abundantes en el medio interestelar) hasta moléculas orgánicas complejas como $\text{C}_3\text{H}_7\text{CN}$ (Belloche et al. 2009, 2014) y $\text{C}_2\text{H}_5\text{OCHO}$ (Belloche 2009, Tercero 2013), detectadas en Sagitario B2(N) y Orión KL. **(ii) Las nubes difusas** o medio neutro frío

(CNM, *Cold Neutral Medium*) presentan densidades más bajas ($n \simeq 20 - 50 \text{ cm}^{-3}$) y temperaturas ligeramente más altas ($T \simeq 50 - 100$ K). El gas se encuentra fundamentalmente en forma atómica y neutra (regiones HI), y se pueden observar mediante la línea a 21 cm del átomo de H. Las nubes difusas son casi transparentes a la luz de las estrellas que se encuentran detrás de la nube, excepto en una serie de longitudes de onda específicas donde se producen líneas de absorción. **(iii) Las nubes translúcidas** representan la transición entre las nubes difusas y las nubes oscuras, y contienen gas atómico y molecular. Tienen extinciones visuales intermedias.

El resto de la materia interestelar, que se extiende entre las nubes, existe en tres formas diferentes: **(vi) El medio neutro templado** (WNM, *Warm Neutral Medium*), está formado principalmente por gas atómico (regiones HI) con $T \simeq 6000 - 10000$ K y $n \simeq 0.2 - 0.5 \text{ cm}^{-3}$. **(v) El medio ionizado templado** (WIM, *Warm Ionized Medium*), está formado por gas completamente ionizado a $T \simeq 8000$ K y $n \simeq 0.2 - 0.5 \text{ cm}^{-3}$. El gas caliente ionizado y más denso se puede encontrar en el entorno de estrellas OB masivas y calientes que emiten radiación UV capaz de ionizar los átomos de hidrógeno formando una región HII, aunque cons-

tituyen una fracción muy pequeña del volumen y masa del medio interestelar. **(vi) El medio ionizado caliente** (HIM, *Hot Ionized Medium*), también llamado gas coronal, está formado por gas ionizado a $T \simeq 10^6$ K y $n \simeq 0.0065 \text{ cm}^{-3}$. Se localiza en el halo galáctico, en superburbujas de gas ionizado procedente de remanentes de supernova (ver Sección 1.3).

Además de las componentes en fase gas, existe una componente en fase sólida que consiste en pequeños **granos de polvo** que pueden estar recubiertos de mantos de hielo. Los granos de polvo están presentes de manera ubicua en todo tipo de regiones interestelares. Se forman principalmente en las atmósferas de las estrellas gigantes rojas (también en supernovas y novas), en la fase más evolucionada conocida como rama asintótica gigante (AGB, *Asymptotic Giant Branch*; e.g. Knapp & Morris 1985, Gehrz 1989). Estas estrellas desarrollan vientos estelares que transportan el material molecular desde su superficie hacia el exterior con velocidades del orden de $\sim 10 \text{ km s}^{-1}$. Esto produce una envoltura molecular en torno a la estrella que se puede extender hasta distancias de miles de radios estelares. El contenido molecular de la envoltura en expansión está sometido a diversos procesos físicos y químicos a medida que se aleja de la estrella y se mezcla con el medio interestelar (e.g. Lafont et al. 1982). Cuando la temperatura en el interior de la envoltura desciende hasta ~ 1000 K, los elementos con mayor carácter refractario se condensan y forman los granos de polvo (e.g. Gail et al. 1984, Gehrz 1989). Éstos granos se incorporan a la envoltura en expansión y son expulsados posteriormente al medio interestelar. Su composición inclu-

ye minerales como silicatos y óxidos, así como material carbonáceo, con una distribución de tamaños entre nm y μm .

El polvo interestelar juega un papel muy importante tanto en la física como en la química del medio interestelar, en particular:

- Influye en el balance energético del medio interestelar, interviniendo en procesos de calentamiento y enfriamiento del gas (e.g. efecto fotoeléctrico y colisiones entre gas-polvo; ver Secciones 1.4.2.1 y 1.4.2.5).
- Absorben la radiación UV y VIS haciendo que la nube se vuelva opaca a dichas longitudes de onda y protegiendo a las moléculas presentes en el interior de la nube de procesos como la fotodisociación o la ionización.
- Casi la mitad de toda la energía emitida por las estrellas en la Galaxia en el rango UV, VIS e NIR es absorbido por el polvo y re-emitido a longitudes de onda más largas (FIR y MIR).
- En las nubes oscuras, moléculas como H_2O , CO , CO_2 , NH_3 , CH_4 , etc. condensan en la superficie de los granos de polvo formando mantos de hielo de $\sim 0.01 \mu\text{m}$ de espesor (e.g. Zubko et al. 2004), por lo que en estas regiones la mayor parte del material molecular está probablemente en forma de hielos en lugar de en fase gas. En los mantos de hielo se pueden producir reacciones químicas formando nuevas moléculas. El calentamiento del grano puede evaporar el manto y liberar las moléculas sintetizadas al medio interestelar.

1.3. Objetos interestelares

■ Regiones HII

Las regiones HII se encuentran en el interior o bordeando las nubes moleculares y son regiones de hidrógeno ionizado creadas y mantenidas por la radiación UV estelar. Las estrellas masivas tipo OB ionizan y calientan el medio circundante formando una región HII a su alrededor, en donde el gas está formado principalmente por protones y electrones ($\text{H} + h\nu \rightarrow \text{H}^+ + \text{e}^-$; $h\nu > 13.6\text{eV}$). El tamaño de esta región depende de la energía radiada por la estre-

lla y de la densidad de la región, y recibe el nombre de esfera de Strömgren. Las regiones HII alcanzan temperaturas de $T \simeq 5000 - 10000$ K, y tienen una gran variedad de tamaños, desde regiones HII ultra-compactas ($\sim 0.5 \text{ pc}$) hasta regiones HII gigantes (que pueden alcanzar tamaños de cientos de parsecs). El rango de densidades varía desde $10^3 - 10^4 \text{ cm}^{-3}$ en las regiones compactas (e.g. Gran Nebulosa de Orión, M42), hasta $\sim 10 \text{ cm}^{-3}$ en las regiones HII más difusas y extensas (e.g. Nebulosa de Norteamérica, NGC 7000). Los electrones libres y los núcleos de

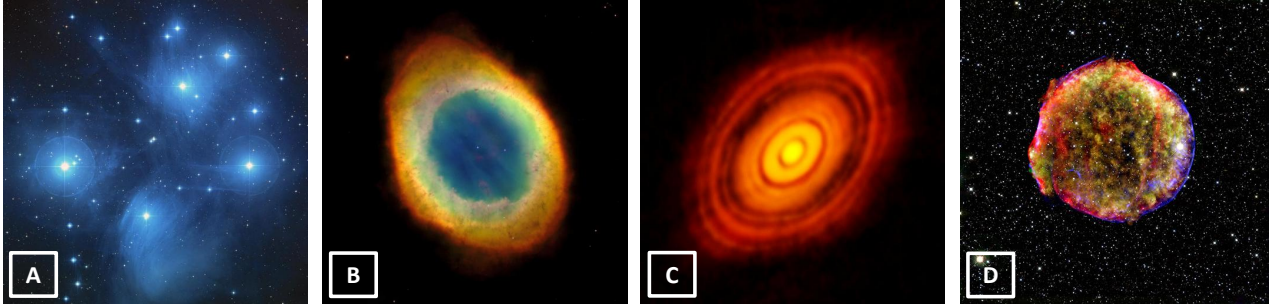


Figura 1.2: **A.** Imagen del cúmulo abierto de las Pléyades realizada por el telescopio Palomar 48-inch Schmidt. El polvo alrededor de las estrellas más brillantes forma una Nebulosa de Reflexión. Créditos: NASA, ESA and AURA/Caltech. **B.** Imagen de la Nebulosa del Anillo (M57) realizada por el Telescopio Espacial Hubble (HST, *Hubble Space Telescope*). M57 es una nebulosa planetaria iluminada por una enana blanca. Créditos: The Hubble Heritage Team (AURA/STScI/NASA). **C.** Imagen obtenida por ALMA del disco protoplanetario que rodea a HL Tauri. Créditos: ALMA (ESO/NAOJ/NRAO). **D.** Imagen de la remanente de la supernova de Tycho (SN 1572). Combinación de imágenes obtenidas en RX por el Observatorio de rayos X Chandra (azul, verde y amarillo), en IR por el Telescopio Espacial Spitzer (rojo), y en VIS con el telescopio de 3.5 m de Calar Alto (componente estelar). Créditos: RX: NASA/CXC/SAO; IR: NASA/JPL-Caltech; VIS: Calar Alto, O.Krause et al.

hidrógeno o iones producidos tras la ionización de los átomos (H, He, C...) se vuelven a recombinar emitiendo nuevos fotones en cualquier dirección, produciendo la dispersión y diluyendo el campo de radiación que emite la estrella. Por ello, cuanto mayor es la distancia a la estrella, menor es el número de fotones ionizantes por unidad de volumen. Estas regiones se pueden observar a partir de (i) la emisión libre-libre en el radio continuo del gas ionizado, (ii) las líneas de recombinación de H y He, (iii) la emisión de líneas prohibidas como [OII], [OIII] y [NII], y (iv) la emisión IR debida al polvo caliente.

■ Regiones de fotodisociación

Las regiones de fotodisociación (PDRs, *PhotoDissociation Regions*) se refieren de manera general a aquellas zonas de las nubes moleculares sobre las que inciden fotones FUV (*Far-UV*; $6\text{ eV} < h\nu < 13.6\text{ eV}$) del campo de radiación interestelar o de estrellas calientes cercanas (de tipo espectral O y B). En estas regiones, el balance de energía y la química del gas está controlado por los fotones FUV. En el Capítulo 3 se explican en detalle.

■ Nebulosas de Reflexión y Emisión

Las **Nebulosas de Reflexión** son nubes de gas y polvo que reflejan la luz de una estrella brillante cercana. Esta energía no es suficiente para ionizar el gas que la rodea

y transformarse en una **Nebulosas de Emisión**. Sin embargo, sí es suficiente para que se produzca la dispersión de la luz en los granos de polvo. Las Nebulosas de Reflexión están iluminadas por estrellas de tipo espectral más tardías que B1. En estos objetos también se puede observar la emisión IR del polvo caliente. La Nebulosa Cabeza de Bruja (NGC 1909), NGC 2068 en Orión y la nube de gas y polvo que rodea al cúmulo abierto de las Pléyades (M45) en la constelación de Tauro (Fig. 1.2–A), son ejemplos de Nebulosas de Reflexión. Entre las Nebulosas de Emisión se pueden incluir las regiones HII (iluminadas por estrellas masivas y jóvenes; e.g. NGC 604 o la Nebulosa Cabeza de Mono, NGC 2174), y las nebulosas planetarias (en torno a una enana blanca caliente; e.g. la Nebulosa del Anillo, M57, Fig. 1.2–B).

■ Hot Cores y Hot Corinos

Los *hot cores* son las regiones de material molecular denso ($n \geq 10^6\text{ cm}^{-3}$) y caliente ($T \geq 100\text{ K}$) alrededor de protoestrellas masivas en las primeras fases de su evolución (e.g. Orión KL, W3(H₂O), G29.96). Si las protoestrellas son de baja masa (de tipo Solar), estas regiones se denominan *hot corinos* (e.g. NGC 1333 IRAS 4A, HH212, IRAS 16293-2422). En estas regiones se observa una gran complejidad química debido a la desorción térmica del manto de hielo que recubre los granos de polvo y la pos-

terior química en fase gas. Destaca la elevada abundancia de especies hidrogenadas (e.g. H_2O , NH_3 , CH_3OH) y de moléculas orgánicas complejas (e.g. CH_3OCH_3 , CH_3COOH).

■ Discos protoplanetarios

Un disco protoplanetario es un disco de acreción de gas y polvo alrededor de una estrella joven de tipo T Tauri y Herbig-Ae/Be (Fig. 1.2–C). Estos discos de gas y polvo contienen el material a partir del cual se formarán los planetas. Los discos protoplanetarios engloban en un solo objeto una gran variedad de regiones (e.g. Dullemond et al. 2007, Bergin et al. 2007), y tanto las condiciones físicas como las condiciones químicas varían enormemente de una zona a otra: **(i) Plano vertical medio.** Región muy densa y fría ($\simeq 10$ K) donde las moléculas se condensan sobre la superficie de los granos de polvo formando mantos de hielo (e.g. Aikawa et al. 1997). **(ii) Región intermedia.** El gas está un poco más caliente > 20 K y los mantos de hielo subliman enriqueciendo químicamente la fase gas (e.g. Aikawa et al. 2002). **(iii) Superficie del disco.** Esta región alcanza altas temperaturas debido a que está iluminada por

la radiación UV de la protoestrella. Las moléculas en esta región se fotodisocian (e.g. Willacy & Langer 2000; Agúndez et al. 2008). Si el disco protoplanetario está iluminado por radiación UV procedente de estrellas OB cercanas, recibe el nombre de *proplyd*).

■ Remanente de supernova

Una remanente de supernova (SNR, *SuperNova Remnant*) se forma cuando el material eyectado en la explosión de una supernova choca con el medio interestelar circundante. Las remanentes de supernova emiten intensamente en longitudes de onda de radio, debido a los electrones relativistas que giran en espiral alrededor de un campo magnético (radiación sincrotrón), y en rayos X, debido a la emisión del gas caliente ($\sim 10^6$ K). En la Vía Láctea se pueden observar cerca de 100 remanentes de supernova. La Nebulosa del Cangrejo (M1), SN 1987A, SN 1572 (Fig. 1.2–D), la supernova de Kepler (SN 1604) y G1.9+0.3 están entre las remanentes de supernova más conocidos y estudiados.

1.4. Intercambios de Energía en el Medio Interestelar

1.4.1. Fuentes de energía en el ISM

Existen distintas fuentes astronómicas que suministran energía al medio interestelar influyendo en el estado físico y químico del gas y del polvo: radiación estelar, campos magnéticos, rayos cósmicos y fenómenos violentos como explosiones de supernova o vientos estelares. La contribución de cada una de ellas al calentamiento del gas y del polvo depende de los procesos de interacción entre la fuente de energía y la materia (ver Sección 1.4.2). A continuación se explica con más detalle cada una de las fuentes de energía del medio interestelar:

■ **Campo de radiación.** El campo de radiación interestelar en el VIS y UV proviene principalmente de la emisión estelar. El campo de radiación estelar depende del tipo espectral de la estrella: las estrellas tempranas dominan en el rango FUV (ver Capítulo 3), las estrellas tipo A en la región VIS, y las estrellas tardías desde el FIR hasta el NIR. El campo de radiación estelar también contribuye indirectamente en

bandas de emisión discretas en el MIR, en la emisión continua en el FIR y en el submilimétrico, ya que los fotones estelares (UV y VIS) son absorbidos por los granos de polvo y PAHs, y re-emitidos a longitudes de onda más largas.

La intensidad del campo de radiación estelar promedio descende bruscamente en el límite de Lyman (λ 912 Å) ya que el hidrógeno neutro absorbe toda la radiación. Las estrellas no contribuyen mucho a las longitudes de onda más cortas (rayos X). Sin embargo, la emisión de los plasmas calientes (el gas coronal en el halo galáctico y en remanentes de supernova) domina a longitudes de onda más cortas. Esta componente muestra numerosas líneas de emisión. El fondo cósmico de microondas domina en la región de longitudes de onda milimétricas (ver Fig. 1.3).

■ **Campos magnéticos.** Los campos magnéticos son una fuente importante de energía y presión en el medio interestelar, e influyen en la dinámica del gas. El campo magnético se manifiesta a través de varios efectos observables en el

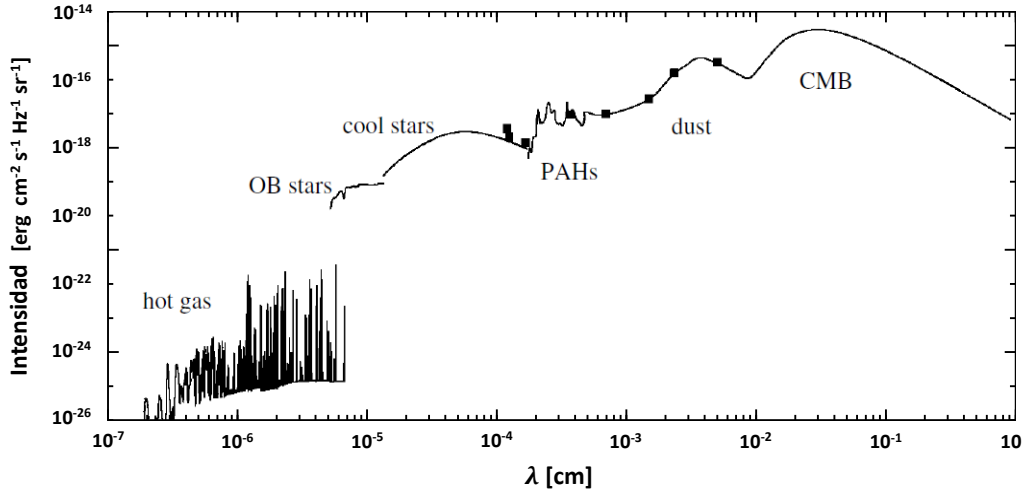


Figura 1.3: Distribución de la radiación en función de la longitud de onda. La intensidad media está en unidades de $\text{erg cm}^{-2} \text{s}^{-1} \text{Hz}^{-1} \text{sr}^{-1}$ del campo de radiación interestelar en la vecindad solar. Se indican las contribuciones de gas caliente, estrellas OB, estrellas frías, moléculas grandes (PAHs), polvo y el fondo cósmico de microondas (Tielens 2005).

medio interestelar, como por ejemplo: (i) la polarización lineal de la luz de las estrellas producida por la alineación de los granos de polvo a lo largo de sus líneas de campo, (ii) la polarización de emisión continua en el FIR del polvo interestelar, (iii) la polarización lineal de la emisión sincrotrón, o (vi) el desdoblamiento Zeeman de la línea H α a 21 cm y en líneas espectrales de moléculas con electrones desapareados como OH.

■ **Rayos cósmicos.** Están compuestos por un 84 % de protones, 14 % de partículas α , 1 % de electrones y 1 % de núcleos más pesados. Su espectro electromagnético se extiende desde 10^6 eV a 10^{20} eV. Los rayos cósmicos de baja energía (~ 100 MeV) son importantes para el calentamiento y la ionización del gas interestelar (ver Sección 1.4.2.6). La interacción de protones energéticos (1 – 10 GeV) con el gas interestelar da lugar a los rayos gamma con $E_\gamma \gtrsim 50$ MeV a través de la desintegración del pión neutro (π^0) que se forma al chocar el protón energético con un núcleo atómico. Del mismo modo, la interacción entre los electrones energéticos (< 1 GeV) y el gas interestelar da lugar a los rayos gamma a través de la radiación de frenado (*bremsstrahlung* o radiación libre-libre) y dispersión Compton inversa.

■ **Energía cinética.** Los flujos de gas procedentes de estrellas jóvenes, explosiones de supernova, vientos estelares,

o superburbujas, entre otros, suministran energía cinética a gran escala al medio interestelar. Estos eventos barren y comprimen el entorno circundante provocando turbulencias que calientan el gas debido a efectos de dinámica de fluidos, e influyendo de manera importante en la morfología del medio interestelar.

1.4.2. Procesos de calentamiento del gas

En esta Sección se presentan los mecanismos más importantes de calentamiento del medio interestelar, entendiendo por calentamiento la transferencia de energía cinética a átomos, moléculas e iones presentes en el gas interestelar. Los procesos de calentamiento consisten principalmente en la eliminación de un electrón de una especie interestelar (en fase gas o en los granos de polvo) al incidir sobre ellos un fotón o una partícula energética (rayos cósmicos o rayos X). El electrón energético eyectado calienta el gas interestelar por medio de colisiones elásticas. La excitación radiativa de átomos, moléculas o iones no produce transferencia de energía cinética ni contribuye directamente al calentamiento, aunque la desexcitación colisional de los niveles excitados puede transferir energía al gas y calentarlo si el medio es lo suficientemente denso.

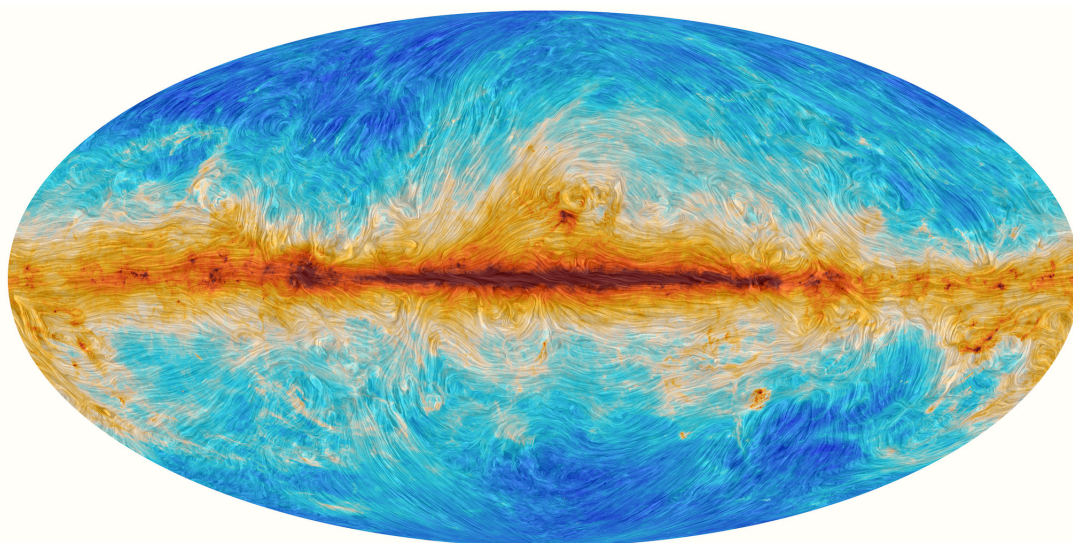


Figura 1.4: Campo magnético a lo largo del plano de la galaxia. La escala de color representa la intensidad de la radiación del polvo cósmico. Las nubes interestelares de polvo y gas (condensaciones densas en la imagen) están atravesadas por el campo magnético de la galaxia. Los granos de polvo se orientan con su eje mayor perpendicular a las líneas de campo, lo que provoca que la radiación térmica esté parcialmente polarizada, lo que a su vez indica la orientación del campo magnético. Créditos: ESA/Planck.

1.4.2.1. Calentamiento por efecto fotoeléctrico

El efecto fotoeléctrico es uno de los mecanismos más importantes de calentamiento del gas del medio interestelar. El efecto fotoeléctrico consiste en la emisión de electrones por un material al incidir sobre él radiación electromagnética (Einstein 1905). Debido a que los fotones FUV penetran hasta varias magnitudes de profundidad en las nubes del medio interestelar (A_V) se produce la emisión de fotoelectrones energéticos de los granos de polvo y de grandes moléculas PAHs (*Polycyclic Aromatic Hydrocarbons*). Estos fotoelectrones energéticos pierden su energía al colisionar con las partículas presentes en la fase gas. La diferencia entre el calentamiento fotoeléctrico y el enfriamiento debido a la recombinación de este fotoelectrón con el grano, resulta en un calentamiento neto del gas (e.g. Watson 1972, Jura 1976, Draine 1978, de Jong et al. 1980, Tielens & Hollenbach 1985b, d'Hendecourt & Léger 1987, Hollenbach 1989, Bakes & Tielens 1994).

La energía cinética del electrón emitido se calcula como la diferencia entre la energía necesaria para liberar el electrón y la energía del fotón absorbido:

$$E_k = h\nu - h\nu_0, \quad (1.1)$$

que también puede escribirse como:

$$E_k = h\nu - W, \quad (1.2)$$

siendo h la constante de Planck, ν_0 la frecuencia de corte o frecuencia mínima que tienen que tener los fotones para que tenga lugar el efecto fotoeléctrico y W la función de trabajo del material (la energía mínima necesaria para emitir un electrón que depende de la carga del grano, de la temperatura y de la densidad de electrones).

En la Fig. 1.5 se muestra un esquema del mecanismo de calentamiento por efecto fotoeléctrico en granos de polvo y grandes moléculas PAHs (Tielens 2005). Los fotones FUV absorbidos por un grano de polvo o PAH crean fotoelectrones energéticos que se difunden en el grano perdiendo energía a través de colisiones (en el caso de los PAHs la difusión no tiene lugar). Si durante el proceso de difusión los electrones alcanzan la superficie con una energía mayor que la función de trabajo del grano y que el potencial de Coulomb, Φ_c (si el grano está cargado positivamente), el fotoelectrón será eyectado a la fase gas. Si los fotones incidentes tienen una energía menor que la función de trabajo, los electrones no obtienen la energía suficiente para escapar de la superficie del material.

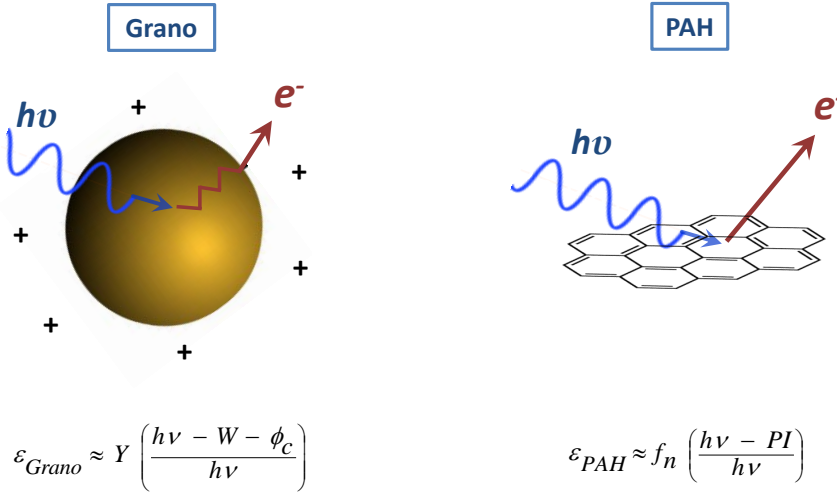


Figura 1.5: Mecanismo de calentamiento por efecto fotoeléctrico sobre granos de polvo y PAHs. Se indica también las eficiencias, ϵ , de ambos procesos.

La eficiencia del **efecto fotoeléctrico en granos de polvo** (ϵ_{grano}) es el cociente entre el calentamiento del gas y la energía UV total absorbida por los granos de polvo. Viene dada por el rendimiento fotoeléctrico, Y , que mide la probabilidad de que el electrón escape del grano, multiplicado por la fracción de la energía del fotón convertida en energía cinética del fotoelectrón:

$$\epsilon_{\text{grano}} \approx Y \left(\frac{h\nu - W - \Phi_c}{h\nu} \right), \quad (1.3)$$

donde por simplicidad se ha asumido que no se pierde energía dentro del grano. El término Y es una función compleja que depende del tamaño y material del grano, de la longitud a la que se absorbe el fotón UV dentro del grano y de la energía del fotón, entre otros (Watson 1972). Se calcula que el rendimiento del efecto fotoeléctrico por fotón UV absorbido es de $\sim 0.1 - 1$. Para granos de gran tamaño y fotones de alta energía, los fotones se absorben hasta $\sim 100 \text{ \AA}$ dentro del grano y los fotoelectrones tienen una baja probabilidad de escapar ($Y \approx 0.1$, es decir, solo uno de cada diez fotones conlleva a la eyección de un fotoelectrón energético). Sin embargo, para granos de polvo muy pequeños, $Y \approx 1$ y la probabilidad de escapar es máxima. (e.g. Watson 1972, Jura 1976, Draine 1978, de Jong et al. 1980, d'Hendecourt & Léger 1987, Tielens 2005). Si la energía media de un fotón FUV es de 10 eV, y el valor típico de la función de trabajo de un grano interestelar neutro es de 6 eV (de Jong et al. 1980), la eficiencia máxima es solo de $\epsilon_{\text{grano}} \approx 0.05$ para

granos neutros de gran tamaño. Aproximadamente el 5% de la energía en forma de radiación UV calienta el gas a través del efecto fotoeléctrico, y el resto calienta el grano y es re-irradiado como continuo IR. La eficiencia disminuye en granos cargados positivamente debido principalmente a que la interacción coulombiana hace que el fotoelectrón eyectado tenga una energía cinética menor.

El potencial electrostático del grano viene dado por:

$$\Phi_c = Z_d e^2 a^{-1} \approx 10^{-4} \gamma \quad [\text{eV}], \quad (1.4)$$

siendo Z_d la carga iónica del grano, a el tamaño del grano y γ el parámetro de fotoionización, que es una medida de la relación entre la velocidad a la que los fotones FUV inciden sobre los granos de polvo, y la velocidad a la que los electrones se recombinan con los granos. La eficiencia del proceso de calentamiento por efecto fotoeléctrico disminuye con este parámetro (de Jong et al. 1980):

$$\gamma = 2.9 \times 10^{-5} G_0 T^{1/2} n_e^{-1} \quad [\text{cm}^3 \text{ K}^{1/2}], \quad (1.5)$$

donde n_e es la densidad electrónica, T la temperatura y G_0 el flujo de radiación FUV incidente en unidades del campo de Habing (ver Capítulo 3). Por lo tanto, la eficiencia del efecto fotoeléctrico en los granos de polvo, ϵ_{grano} , depende de la carga del grano y de la proporción de la tasa de ionización sobre la tasa de recombinación de los electrones en granos (parámetro de fotoionización, γ).

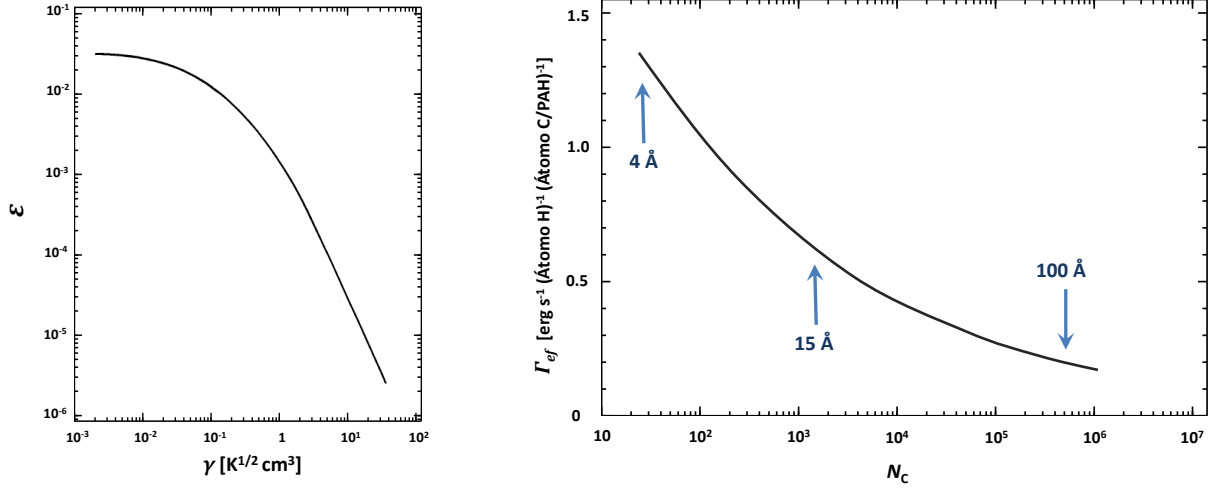


Figura 1.6: *Izda.* Curva de eficiencia del calentamiento por efecto fotoeléctrico, donde se representa la eficiencia, ϵ_{grano} , frente al parámetro de ionización, γ (Tielens & Hollenbach 1985). *Dcha.* Contribución al calentamiento por efecto fotoeléctrico del gas interestelar de PAHs y granos de polvo que contienen diferente número de átomos de carbono, N_c . Por ejemplo, un PAH que contiene 50 átomos de carbono y 20 átomos de hidrógeno, tiene una tamaño de $\sim 6 \text{ \AA}$ (Tielens 2005).

La Fig. 1.6 (*izda.*) muestra la curva de eficiencia del calentamiento por efecto fotoeléctrico sobre granos de polvo, donde se representa la eficiencia, ϵ_{grano} , frente al parámetro de ionización, γ (gráfica obtenida de Tielens & Hollenbach 1985; Draine 1978, de Jong et al. 1980 y d'Hendecourt & Léger 1987 muestran gráficas similares utilizando distintos modelos de calentamiento). Para bajos parámetros de fotoionización ($\gamma \ll 1$), los granos están en estado neutro y la eficiencia del calentamiento fotoeléctrico es máxima ($\epsilon_{\text{grano}} \gg 0.01$). En cambio, para altos parámetros de ionización $\gamma \gg 1$, los granos se cargan eléctricamente y la eficiencia de calentamiento disminuye.

La eficiencia del **efecto fotoeléctrico en PAHs**, ϵ_{PAH} , es mayor que en granos (Fig. 1.5). Viene dada por la expresión:

$$\epsilon_{\text{PAH}} \approx f_n \left(\frac{h\nu - PI}{h\nu} \right). \quad (1.6)$$

En el caso de PAHs, el factor limitante es el potencial de ionización, PI . Los fotones FUV absorbidos por un catión de PAH no provocan la eyección de un fotoelectrón, y, por lo tanto, tampoco el calentamiento del gas. El potencial de ionización de un PAH cargado viene dado por:

$$PI = W + \Phi_c = W + (Z + 0.5)e^2 C^{-1} = W + (Z + 0.5)\pi e^2 (2a)^{-1} \quad (1.7)$$

donde W es la función de trabajo del grafito (Takahashi et al. 1985), Φ_c el potencial de Coulomb, Z la carga del PAH, a el radio del PAH, y C la capacitancia del PAH (se ha aproximado a un disco delgado). Con una energía media de un fotón FUV de 10 eV y un potencial de ionización de 7 eV, la eficiencia máxima es de $\epsilon_{\text{PAH}} \approx 0.15$. La eficiencia del calentamiento fotoeléctrico debido a pequeños PAHs, se reduce a la fracción de PAHs neutros, $f(Z = 0)$, que todavía pueden ser ionizados por fotones FUV. Considerando un PAH con dos estados de ionización, 0 y +1, la fracción neutra viene dada por:

$$f(Z = 0) = (1 + \gamma_0)^{-1}, \quad (1.8)$$

donde γ_0 es la proporción de la tasa de ionización sobre la tasa de recombinación, que para pequeños PAHs viene dada por:

$$\gamma_0 = 3.5 \times 10^{-6} N_c^{1/2} \gamma \quad (1.9)$$

siendo γ el parámetro de fotoionización y N_c el número de átomos de carbono. Para un PAH con 50 átomos de carbono y una fracción neutra de $f(Z = 0) = 0.95$ en una nube difusa, $\gamma_0 = 0.05$. En una PDR densa, la carga de un PAH es más importante ($f(Z = 0) = 0.25$) y $\gamma_0 = 3.5$.

La Fig. 1.6 (*dcha.*) muestra la contribución al calentamiento fotoeléctrico de granos de diferentes tamaños, adop-

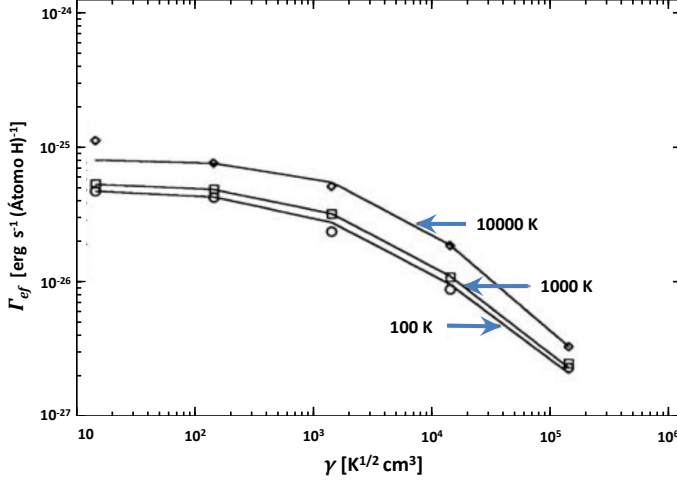


Figura 1.7: Variación de la tasa de calentamiento por átomo de hidrógeno, $\Gamma_{\text{ef}}/n_{\text{H}}$, en función de γ para tres temperaturas distintas. Figura adaptada de Backes & Tielens (1994).

tando una ley potencial de distribución de tamaño (conocida como ley MRN, Mathis et al. 1977). Se representa el calentamiento por efecto fotoeléctrico en función del número de átomos de carbono, N_{C} . Aproximadamente el 50% del calentamiento fotoeléctrico del gas interestelar es debido a los PAHs y a los granos de polvo de un tamaño menor a 15 \AA ($N_{\text{C}} \approx 1500$ átomos de carbono). El otro 50% se origina en granos de tamaños entre 15 \AA y 100 \AA ($1500 < N_{\text{C}} < 5 \times 10^5$ átomos de carbono). Los granos de tamaño $> 100 \text{ \AA}$ casi no contribuyen al calentamiento fotoeléctrico, debido a la baja probabilidad de que los fotoelectrones escapen de granos de gran tamaño.

La tasa de calentamiento por efecto fotoeléctrico, Γ_{ef} , en términos de eficiencia, viene dada por:

$$n\Gamma_{\text{ef}} = 10^{-24} \epsilon n G_0 \quad [\text{erg cm}^{-3} \text{ s}^{-1}], \quad (1.10)$$

definiendo la eficiencia ϵ como:

$$\epsilon = \frac{3 \times 10^{-2}}{1 + 2 \times 10^{-4} (G_0 T^{1/2} / n_e)}. \quad (1.11)$$

En esta ecuación se introduce una dependencia adicional con la temperatura, T , que refleja un aumento en la tasa de recombinación de electrones sobre los granos a altas temperaturas (con $\gamma > 10^3 \text{ K}^{1/2} \text{ cm}^3$) y la consiguiente disminución de carga del grano de polvo. En este caso, la tasa de calentamiento es proporcional a nn_e . Cuando $\gamma \gg 10^4 \text{ K}^{1/2} \text{ cm}^3$, el calentamiento se vuelve ineficiente porque está compensado por el enfriamiento debido a la recombinación electrónica (ver Fig. 1.7). Para las condiciones físicas de las nubes difusas frías del medio interestelar neutro (CNM; $G_0 \approx 1$,

$T \approx 100 \text{ K}$, $n \approx 25 \text{ cm}^{-3}$ y $x = n_e/n \approx 3 \times 10^{-4}$), el parámetro de fotoionización es $\gamma \approx 10^3 \text{ K}^{1/2} \text{ cm}^3$ y la eficiencia es de $\epsilon \approx 0.03$, por lo que se alcanza una tasa de calentamiento de $\Gamma_{\text{ef}} \approx 3 \times 10^{-26} \text{ erg s}^{-1} (\text{átomo H})^{-1}$. En el medio neutro templado (WNM; $G_0 \approx 1$, $T \approx 8000 \text{ K}$, $n \approx 0.25 \text{ cm}^{-3}$ y $x = n_e/n \approx 10^{-2}$), el parámetro de fotoionización es $\gamma \approx 4 \times 10^4 \text{ K}^{1/2} \text{ cm}^3$ y la eficiencia es de $\epsilon \approx 0.003$, por lo que se alcanza una tasa de calentamiento de $\Gamma_{\text{ef}} \approx 3 \times 10^{-27} \text{ erg s}^{-1} (\text{átomo H})^{-1}$. Este mecanismo es totalmente ineficiente en el interior de las nubes moleculares donde no llega la radiación UV.

1.4.2.2. Calentamiento por fotoionización de átomos

La fotoionización es el proceso por el cual la acción de un fotón sobre un átomo, ion o molécula provoca la emisión de un electrón, llamado fotoelectrón. La energía del fotoelectrón eyectado a la fase gas es la diferencia entre la energía del fotón ionizante y la energía de ionización de la especie.

En una región HII, el calentamiento se produce principalmente por la fotoionización del H I, pero en las regiones HI, donde $E < 13.6 \text{ eV}$, casi no existen fotones que ionicen el hidrógeno, y por tanto, son otros elementos los que contribuyen al calentamiento del gas por fotoionización. Entre ellos, el carbono (con un potencial de ionización de 11.2 eV) es el más importante debido principalmente a que es el más abundante. La energía del fotoelectrón liberado en un proceso de fotoionización de un átomo de carbono es $\Delta E_{\text{C}} = 1.06 \text{ eV}$. En este caso, la tasa de calentamiento por fotoionización del átomo de carbono, Γ_{CI} , se calcula como:

$$n\Gamma_{\text{CI}} = 2.2 \times 10^{-22} f(\text{CI}) \mathcal{A}_{\text{C}} n G_0 e^{-2.6A_{\text{v}}} [\text{erg cm}^{-3} \text{s}^{-1}], \quad (1.12)$$

donde \mathcal{A}_{C} es la abundancia de carbono atómico en la fase gas, $f(\text{CI})$ es la fracción neutra del carbono, G_0 el flujo de radiación FUV incidente en unidades del campo de Habing (ver Capítulo 3) y el factor exponencial es la atenuación del polvo de la radiación FUV a una profundidad correspondiente a una extinción visual A_{v} en una nube (Tielens 2005).

Las moléculas de PAHs (y los pequeños granos de polvo) son mucho más eficientes en el calentamiento del gas que los átomos de carbono debido en gran parte a que la fracción neutra de estas especies es mucho mayor. En esencia, las moléculas de PAHs (y los pequeños granos de polvo) tienen tantos grados de libertad internos que pueden absorber la energía cinética que le llega de un electrón recombinante, cuyo coeficiente de velocidad de recombinación ($\sim 10^{-5} \text{ cm}^3 \text{s}^{-1}$) es mucho más alto que el coeficiente de velocidad de recombinación radiativo de iones atómicos ($\sim 10^{-11} \text{ cm}^3 \text{s}^{-1}$; Tielens 2005). Por comparación, la tasa de calentamiento debido a la fotoionización del carbono en las nubes difusas frías del medio interestelar neutro es $\Gamma_{\text{CI}} \approx 4 \times 10^{-28} \text{ erg s}^{-1} \text{ cm}^{-3}$ (Lequeux 2003). Comparado con las tasas de calentamiento por efecto fotoeléctrico, este mecanismo es despreciable en el medio interestelar difuso.

1.4.2.3. Desexcitación colisional y Fotodisociación de H_2

El calentamiento del gas interestelar también se produce a través de procesos derivados de la desexcitación colisional y de la fotodisociación. Debido a su gran abundancia, la fotodisociación del H_2 domina este tipo de calentamiento.

Después de la absorción de un fotón FUV ($h\nu$) en una molécula de hidrógeno, se produce una excitación electrónica desde el estado electrónico basal hasta un estado electrónico excitado. A continuación se produce un decaimiento radiativo ($h\nu'$) que puede dar lugar a varias situaciones (ver Fig. 1.8):

A. El decaimiento radiativo puede dejar a la molécula de

H_2 vibracionalmente excitada en el estado electrónico fundamental. El exceso de energía vibracional puede disiparse de dos formas distintas:

A.1. Desexcitación colisional. El exceso de energía vibracional se transmite a otros átomos, moléculas o electrones calentado el gas. Este proceso se produce generalmente a altas densidades, $n \gtrsim 10^4 \text{ cm}^{-3}$, cuando $n > n_{\text{cr}}$. Las densidades críticas necesarias para que tenga lugar el calentamiento dependen de la temperatura, y son muy altas a bajas temperaturas.

La eficiencia de calentamiento de este proceso es:

$$\varepsilon(\text{H}_2) \simeq \left(\frac{E_{\text{vib}}}{h\nu} \right) f_{\text{H}_2} \simeq 0.17 f_{\text{H}_2}, \quad (1.13)$$

donde E_{vib} es la energía vibracional que se convierte en calentamiento del gas, $h\nu$ la energía del fotón FUV incidente y f_{H_2} la fracción del flujo de fotones FUV bombeado por la molécula H_2 (en PDRs este factor depende de la localización de la transición $\text{H I}/\text{H}_2$; ver Capítulo 3).

La tasa de calentamiento asociada a este proceso es:

$$n\Gamma_{\text{H}_2} = [n(\text{H}) \gamma_{\text{H}} + n(\text{H}_2) \gamma_{\text{H}_2}] n(\text{H}_2^*) E_* [\text{erg cm}^{-3} \text{s}^{-1}], \quad (1.14)$$

donde $n(\text{H}_2^*)$ es la densidad de moléculas de H_2 vibracionalmente excitado. Los coeficientes γ_{H} y γ_{H_2} se calculan, por ejemplo, en Hollenbach & McKee (1979):

$$\gamma_{\text{H}} = 10^{-12} T_{\text{k}}^{1/2} e^{-1000/T_{\text{k}}} [\text{cm}^3 \text{s}^{-1}], \quad (1.15)$$

$$\gamma_{\text{H}_2} = 1.4 \times 10^{-12} T_{\text{k}}^{1/2} e^{-18100/(T_{\text{k}} + 1200)} [\text{cm}^3 \text{s}^{-1}]. \quad (1.16)$$

Este mecanismo solo es importante en regiones suficientemente densas expuestas a altos flujos de radiación UV (e.g. Tielens & Hollenbach 1985). La desexcitación colisional de moléculas de H_2O excitadas por la radiación IR emitida por los granos de polvo es un mecanismo similar que puede ser importante en regiones neutras densas y calientes (e.g. Takahashi et al. 1983).

A.2. Fluorescencia. Se produce un decaimiento radiativo: se emite un fotón NIR produciendo fluorescencia (se devuelven $\sim 0.25 \text{ eV}$ al gas). Este proceso sucede a bajas

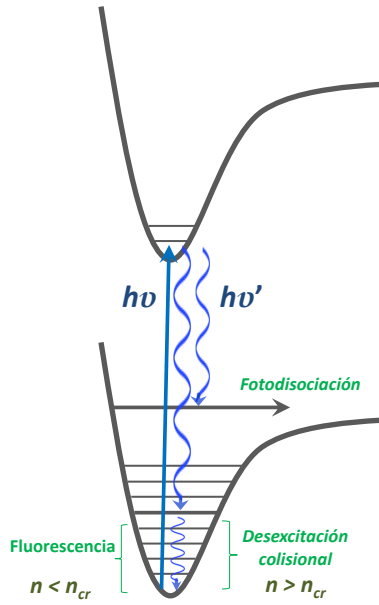


Figura 1.8: Esquema de los procesos de fluorescencia, fotodisociación y desexcitación colisional de la molécula de H₂ tras la absorción de un fotón FUV.

densidades, $n < n_{cr}$, donde no se producen colisiones con otras especies. La tasa de decaimiento radiativo es muy baja ($2 \times 10^{-7} \text{ s}^{-1}$; London 1978) y no produce calentamiento.

B. Fotodisociación. El decaimiento radiativo desde el estado electrónico excitado puede dejar a la molécula de H₂ en el continuo vibracional del estado electrónico fundamental produciendo la disociación de la molécula (10 – 15 % de los casos; Field et al. 1966, Stecher & Williams 1967, Dalgarno 1970). Después de la fotodisociación de la molécula, los fragmentos resultantes se llevan parte de la energía del fotón como energía cinética. Esta energía cinética se comparte rápidamente con otras especies calentando el gas.

La tasa de calentamiento del gas, Γ_{ef} , debido a la fotodisociación del H₂ viene dada por:

$$n\Gamma_{fd} = 4 \times 10^{-14} n(\text{H}_2) k_{\text{bombeo}} [\text{erg cm}^{-3} \text{ s}^{-1}], \quad (1.17)$$

La velocidad de bombeo a estados excitados por absorción de radiación del H₂, k_{bombeo} , se calcula como:

$$k_{\text{bombeo}} = 3.4 \times 10^{-10} \beta(\tau) G_0 e^{-2.6A_V} [\text{s}^{-1}], \quad (1.18)$$

donde el factor numérico es la tasa de bombeo en el campo de radiación interestelar medio. Los otros dos factores tienen en cuenta la atenuación: $\beta(\tau)$ es la reducción del bombeo del campo de radiación FUV debido al autoapantallamiento de las moléculas de hidrógeno que propor-

cionan una profundidad óptica, τ , a la superficie de la nube, y el factor exponencial tiene en cuenta la absorción del polvo.

1.4.2.4. Calentamiento por reacciones químicas

Las reacciones químicas producidas en el medio interestelar pueden liberar sus productos con una cierta energía cinética que contribuye al calentamiento del gas. El proceso más importante es la formación de hidrógeno molecular sobre la superficie de los granos de polvo por asociación directa de los átomos de H (mecanismo Eley-Rideal; ver Sección 3.5.2). Esta reacción es muy exotérmica y produce una energía de 4.48 eV. Parte de esta energía se convierte en energía interna de la molécula que la deja en un estado altamente excitado vibracional y rotacionalmente, otra parte se utiliza para expulsar la molécula recién formada a la fase gas y el resto de energía calienta el grano de polvo. El porcentaje de energía que se lleva cada uno de estos procesos no se conoce con exactitud. El exceso de energía cinética de las moléculas de H₂ liberadas calienta directamente el gas, pero también tiene lugar un calentamiento por desexcitación colisional a través de colisiones con átomos y moléculas del gas que transfieren parte de su energía cinética. La tasa de calentamiento de este proceso, $\Gamma_{\text{form H}_2}$, es muy pequeña en comparación con la tasa de calentamiento

debido al bombeo de fotones FUV:

$$n\Gamma_{\text{form H}_2} = 7.2 \times 10^{-12} \frac{n_{\text{H}} n k_d}{1 + n_{\text{cr}}/n} \epsilon_{\text{quim}} \quad [\text{erg cm}^{-3} \text{s}^{-1}], \quad (1.19)$$

siendo k_d el coeficiente de velocidad para la formación de H_2 en la superficie del grano y ϵ_{quim} la fracción de energía química disponible para calentar el gas (Hunter & Watson 1978, Hollenbach & McKee 1979, Le Bourlot et al. 1995, Le Bourlot et al. 2012, Tielens 2005).

El calentamiento debido a la formación de hidrógeno molecular es importante en los choques dentro de nubes moleculares densas, donde los fotones UV casi no intervienen, y en los bordes de las PDRs densas (ver Capítulo 3).

La energía liberada en otras reacciones químicas exotérmicas en fase gas también contribuye al calentamiento del gas.

1.4.2.5. Calentamiento por colisiones entre gas - polvo

Debido a las bajas densidades del medio interestelar, el gas y el polvo no están en equilibrio termodinámico y con frecuencia tienen temperaturas muy diferentes. Si el polvo está más caliente que el gas (por ejemplo, en la envoltura de una protoestrella), los átomos en fase gas que colisionan contra un grano de polvo pueden ser una importante fuente de calentamiento (e.g. Hollenbach & McKee 1979, 1989, Burke & Hollenbach 1983). La tasa de calentamiento gas-polvo viene dada por:

$$n\Gamma_{\text{g-p}} = 10^{-33} n^2 T^{1/2} (T_d - T) \quad [\text{erg cm}^{-3} \text{s}^{-1}]. \quad (1.20)$$

donde T_d es la temperatura del polvo (ver e.g. Hollenbach 1991). Si el gas está más caliente que el polvo (por ejemplo, en el borde de una región de fotodisociación; ver Capítulo 3), se produce un proceso de enfriamiento. Si el gas y los granos están cargados, la sección eficaz puede aumentar debido al efecto Coulomb en un factor 3 (Tielens 2005). Esta tasa de calentamiento también aumenta si el polvo se mueve en relación al gas a altas velocidades. Esto puede ocurrir cerca de una estrella brillante donde la presión de radiación acelera el polvo, o en los frentes de choque donde la energía cinética del gas se termaliza rápidamente pero los granos de polvo se mantienen en movimiento debido a su inercia.

1.4.2.6. Calentamiento por rayos cósmicos

Los rayos cósmicos transfieren energía a los electrones de los átomos o moléculas del gas excitándolos e ionizándolos. Los rayos cósmicos de baja energía ($\sim 1 - 10$ MeV) son más eficientes ionizando y calentando el gas (e.g. Goldsmith et al. 1969). La energía cinética del electrón primario, resultado de la ionización por el protón de alta energía, se puede disipar por colisiones con otros electrones o a través de segundas ionizaciones o excitaciones de átomos o moléculas de gas. Está disponible una energía cinética total de ~ 35 eV para calentar el gas por cada átomo de hidrógeno ionizado (teniendo en cuenta las ionizaciones primarias y secundarias; Tielens 2005).

Tielens & Hollenbach (1985) deducen la ecuación de calentamiento por rayos cósmicos (incluyendo la ionización del helio):

$$n\Gamma_{\text{rc}} = 1.5 \times 10^{-11} \zeta n(\text{H}_2) \quad [\text{erg cm}^{-3} \text{s}^{-1}]. \quad (1.21)$$

donde ζ es la tasa de ionización por rayos cósmicos por molécula de H_2 .

1.4.2.7. Calentamiento por rayos X

Al igual que en el caso de los rayos cósmicos, la interacción entre rayos X blandos (< 10 keV; procedentes de estrellas en la pre-secuencia principal, gas caliente en la Galaxia, remanentes de supernovas, núcleos de galaxias activas, etc.) y la materia da como resultado la ionización de las especies en fase gas y el calentamiento del gas interestelar a través de la termalización de los electrones eyectados. El calentamiento por rayos X solo es importante hasta cierto grado de profundidad en las nubes atómicas, ya que la ionización y el calentamiento por rayos X disminuyen rápidamente cuando hay más materia interestelar entre la fuente emisora de rayos X y la región de interés. Debido a esto, el calentamiento por rayos X en nubes moleculares es despreciable (Wolfire et al. 1995).

1.4.2.8. Procesos macroscópicos de calentamiento

Los mecanismos de calentamiento descritos hasta ahora se basan en procesos microscópicos. Sin embargo, los movimientos macroscópicos del gas también pueden contribuir al calentamiento. Por ejemplo, durante la fase de colapso gravitacional del núcleo de una nube molecular, el gas se calienta por compresión. Además, como se mencionó en la Sección 1.4.1, las explosiones de supernova, los vientos estelares y, en menor medida, la expansión de las regiones HII, suministran energía cinética a gran escala al medio interestelar (turbulencia y choques).

1.4.3. Procesos de enfriamiento del gas

Los procesos de enfriamiento en el medio interestelar se producen principalmente debido a colisiones inelásticas entre partículas ligeras del gas (electrones, H y H^+) y especies más pesadas (átomos, moléculas e iones). En la colisión, si estas especies pesadas poseen niveles de energía lo suficientemente bajos, las partículas ligeras energéticas les transmitirán parte de su energía cinética. La especie ahora excitada se desexcita emitiendo un fotón (desexcitación radiativa; $n < n_{cr}$), normalmente en el rango FIR y submilimétrico. Se produce el enfriamiento del medio solo si la radiación emitida se escapa fácilmente de la nube.

La tasa de enfriamiento radiativo, Λ_x , debido a una transición desde un nivel i a un nivel j de una especie x , viene dada por (Tielens 2005):

$$n^2 \Lambda_x(v_{ij}) = n_i A_{ij} h\nu_{ij} \beta(\tau_{ij}) \frac{S_x(v_{ij}) - P(v_{ij})}{S_x(v_{ij})}, \quad (1.22)$$

donde n_i es la densidad de población de la especie x en el nivel i , A_{ij} es la probabilidad de transición espontánea, $h\nu_{ij}$ es la diferencia de energía entre los niveles i y j , τ_{ij} es la profundidad óptica de la línea y $\beta(\tau_{ij})$ es la probabilidad de que un fotón creado a una profundidad óptica τ_{ij} escape de la nube. $S_x(v_{ij})$ es la función fuente, que se define como:

$$S_x(v_{ij}) = \frac{2h\nu_{ij}^3}{c^2} \left[\frac{g_i n_j}{g_j n_i} - 1 \right]^{-1}, \quad (1.23)$$

donde g es el peso estadístico del nivel. El campo de radiación de fondo, $P(v_{ij})$, generalmente contiene dos términos:

la radiación cósmica de microondas a 2.7 K y la emisión IR del polvo (a temperatura T_d y a una profundidad óptica $\tau_d(v_{ij})$), tal que:

$$P(v_{ij}) = B(v_{ij}, T = 2.7K) + \tau_d(v_{ij}) B(v_{ij}, T_d), \quad (1.24)$$

siendo $B(v_{ij}, T)$ la función de Planck a una frecuencia v_{ij} y temperatura T .

En general, el enfriamiento del gas interestelar es un proceso muy complejo debido a que los procesos físicos locales (e.g. la excitación por colisiones) se acoplan con las características globales de la nube a través de la transferencia radiativa. Resolviendo la ecuación de equilibrio estadístico en la aproximación del átomo de dos niveles ($u \rightarrow l$), la ecuación 1.22 queda:

$$n^2 \Lambda = n_u A_{ul} h\nu_{ul} = \frac{g_u/g_l e^{(-h\nu_{ul}/kT)}}{1 + n_{cr}/n + g_u/g_l e^{(-h\nu_{ul}/kT)}} \mathcal{A}_j n A_{ul} h\nu_{ul}, \quad (1.25)$$

siendo \mathcal{A}_j la abundancia de la especie j .

En el límite de baja densidad ($n < n_{cr}$), la expresión de la tasa de enfriamiento se simplifica:

$$n^2 \Lambda = n^2 \mathcal{A}_j \gamma_{lu} h\nu_{ul}, \quad (1.26)$$

siendo γ_{lu} el coeficiente de excitación colisional.

Entre los mecanismos de enfriamiento del gas, la refrigeración a través de las líneas de estructura fina de CII y OI (ver Sección 1.4.3.1) domina en casi todo el medio interestelar, con excepción del gas caliente y en las regiones más profundas de las nubes moleculares. En las regiones HII la recombinación de electrones con iones positivos (H^+ , partícula α , etc.) y la radiación libre-libre (o *bremsstrahlung*, que consiste en la desaceleración del electrón libre al pasar cerca de un ion positivo sin llegar a capturarlo) son también mecanismos de refrigeración muy importantes. En las nubes moleculares frías, el proceso de enfriamiento más importante tiene lugar a través de la excitación de líneas rotacionales de baja energía del CO y de sus isotopólogos (ver Sección 1.4.3.2).

El polvo también influye en la refrigeración del medio

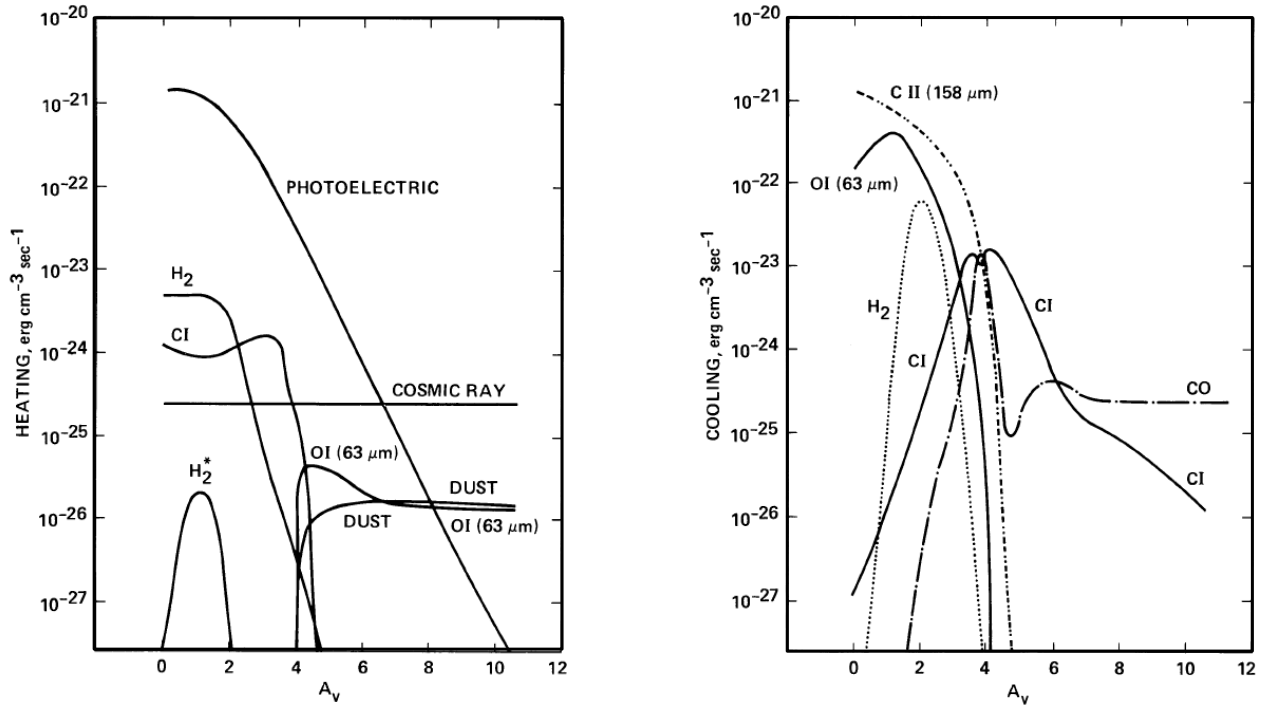


Figura 1.9: Tasas de calentamiento (*izda.*) y enfriamiento (*dcha.*) para una PDR con $n_H = 1000 \text{ cm}^{-3}$ y $G_0 = 1000$ en unidades de Habing, en función de la extinción visual (Hollenbach et al. 1991). **Procesos de calentamiento:** “Photoelectric” se refiere al mecanismo de calentamiento por efecto fotoeléctrico; “H₂” se refiere a la fotodisociación del H₂; “H₂^{*}” es el calentamiento debido a la desexcitación colisional de la molécula de H₂ tras la absorción de fotones FUV; “CI” es la fotoionización del átomo de carbono; “OI” (63 μm) es la tasa de calentamiento debido a la desexcitación colisional del oxígeno atómico por bombeo de fotones IR; “dust” se refiere a las colisiones con polvo caliente. **Procesos de enfriamiento:** “CI” se refiere a la suma de [CI] 370 μm y 609 μm; “H₂” y “CO” representan el enfriamiento por transiciones rotacionales y vibracionales de estas moléculas.

interestelar a través de la recombinación de partículas cargadas sobre los granos, o del intercambio de energía gas-polvo (procesos inversos de algunos mecanismos de calentamiento ya mencionados; ver Sección 1.4.2.1 y 1.4.2.5).

1.4.3.1. Enfriamiento por líneas de estructura fina

Los átomos e iones que enfrían el gas más eficientemente a través de este proceso son los más abundantes y los que tienen niveles de estructura fina cercanos al nivel fundamental, y por lo tanto fáciles de excitar: (i) principalmente CII y OI en el medio neutro, y (ii) OII, OIII, NII, NIII, NeII y NeIII en regiones HII.

En el medio neutro (hidrógeno atómico no ionizado) casi todo el carbono presente en la fase gas está en forma de CII y casi todo el oxígeno como OI. El Ni es también

abundante, pero no tiene transiciones de interés para el proceso de enfriamiento. SiII, SII y FeII son abundantes y tienen transiciones de estructura fina, pero la energía necesaria para su excitación solo se alcanza en colisiones con electrones energéticos y altas densidades. A bajas temperaturas sólo se puede excitar el nivel superior de estructura fina de CII ($^2P_{1/2} \rightarrow ^2P_{3/2}$; $E_u/k = 91.2 \text{ K}$). El primer nivel de estructura fina de OI está a $E_u/k = 228 \text{ K}$, por lo que requiere temperaturas más altas que el CII.

En regiones con baja densidad ($n < 3 \times 10^3 \text{ cm}^{-3}$), la tasa de enfriamiento a través de la línea de estructura fina [CII] 158 μm, $\Lambda_{\text{[CII]}}$, es:

$$\Lambda_{\text{[CII]}} = 3 \times 10^{-27} n^2 \left(\frac{\mathcal{A}_C}{1.4 \times 10^{-4}} \right) \times \left(1 + 0.42 \left(\frac{x}{10^{-3}} \right) \right) e^{-92/T} [\text{erg cm}^{-3} \text{ s}^{-1}], \quad (1.27)$$

siendo \mathcal{A}_C la abundancia del carbono y x el grado de ionización (Tielens 2005).

A temperaturas superiores a 100 K, empieza a ser importante la desexcitación de otros átomos e iones, como [OI] 63μ ($^3P_1 \rightarrow ^3P_2$) y [OI] 146μ ($^3P_0 \rightarrow ^3P_1$; tasas de enfriamiento en Rölling et al 2006). A $T > 5000$ K, el gas atómico se enfría a través de la excitación del nivel metaestable 1D_2 de [OI] 6300 Å y de la línea $\text{Ly}\alpha$ ($\lambda \simeq 1216\text{ Å}$) del hidrógeno (Spitzer 1978).

1.4.3.2. Enfriamiento a través de transiciones rotacionales de moléculas

A más bajas temperaturas, las transiciones rotacionales de moléculas son una forma más efectiva de enfriar el gas que las transiciones atómicas, ya que hay más niveles dis-

ponibles y porque las energías involucradas son mucho más pequeñas. Las tasas de enfriamiento dependen de las abundancias moleculares asumidas y de la profundidad óptica de las transiciones implicadas, y se tienen que calcular para cada molécula y transición resolviendo la ecuación de equilibrio estadístico (Tielens 2005). A bajas densidades, el CO domina el enfriamiento debido a su elevada abundancia en las nubes moleculares. El ^{13}CO comienza a contribuir al enfriamiento a $n > 10^3\text{ cm}^{-3}$. A pesar de la baja relación isotópica de $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ ($\simeq 65$ en el medio interestelar), el enfriamiento de ^{13}CO puede ser comparable al enfriamiento de ^{12}CO porque las transiciones de este último son ópticamente espesas (i.e. los fotones emitidos no logran escapar de la nube y contribuir al enfriamiento del gas). Otras especies como H_2 y H_2O contribuyen notablemente al enfriamiento en choques (e.g. protoestrellas).

Capítulo 2

La región de Orión

2.1. Introducción

La constelación de Orión (también conocida como el Cazador), visible desde ambos hemisferios, es quizás la constelación más conocida y fotografiada del cielo. Esta constelación alberga el **Complejo de Orión**, formado por un gran número de nebulosas brillantes, nubes oscuras y estrellas jóvenes de baja y alta masa. Es una de las regiones de formación estelar más cercana y activa por lo que es objeto de numerosas investigaciones: estudios sobre formación y distribución de estrellas, así como de su distribución de masas, química y morfología de las nubes moleculares (PDRs, *hot cores*...), o propiedades de enanas marrones jóvenes, discos protoplanetarios (conocidos como *proplyds*) y discos circunestelares (ver las revisiones de O'Dell 2001 y Bally 2008 sobre Orión). Destaca especialmente por albergar la región de formación de estrellas masivas más cercana (~ 414 pc; Menten et al. 2007). Las estrellas masivas se for-

man en los cúmulos más densos y masivos de las nubes moleculares y tras su formación, esculpen el medio interestelar a su alrededor. Crean superburbujas de cientos de parsecs de diámetro y tanto la energía que desprenden (UV) como los procesos que inyectan momento a la nube circundante (vientos, explosiones de supernova...) dominan la evolución de las regiones de formación estelar. Por tanto, Orión ofrece la oportunidad de investigar en un entorno cercano la interacción de la radiación UV procedente de estrellas masivas y asociaciones OB con el medio interestelar circundante, lo que contribuye a una mejor comprensión de una amplia gama de objetos y entornos en nuestra galaxia (medio interestelar difuso, interfases entre regiones HII y nubes moleculares, PDRs, nebulosas de reflexión y planetarias, *proplyds*...) y en otras galaxias con formación estelar (ver Sección 2.4).

2.2. Componente estelar de la región de Orión

Durante los últimos 12 millones de años se han formado en Orión al menos 10^4 estrellas de baja y alta masa. Algunas de las estrellas más masivas explotaron como supernovas creando una superburbuja de unos 300 pc de diámetro

(conocida como superburbuja Orión—Eridanus), cuya frontera más cercana al Sol se encuentra a tan solo 180 pc (e.g. Reynolds & Ogden 1979, Brown et al. 1994, Bally 2008, Muench et al. 2008, Briceño 2008).

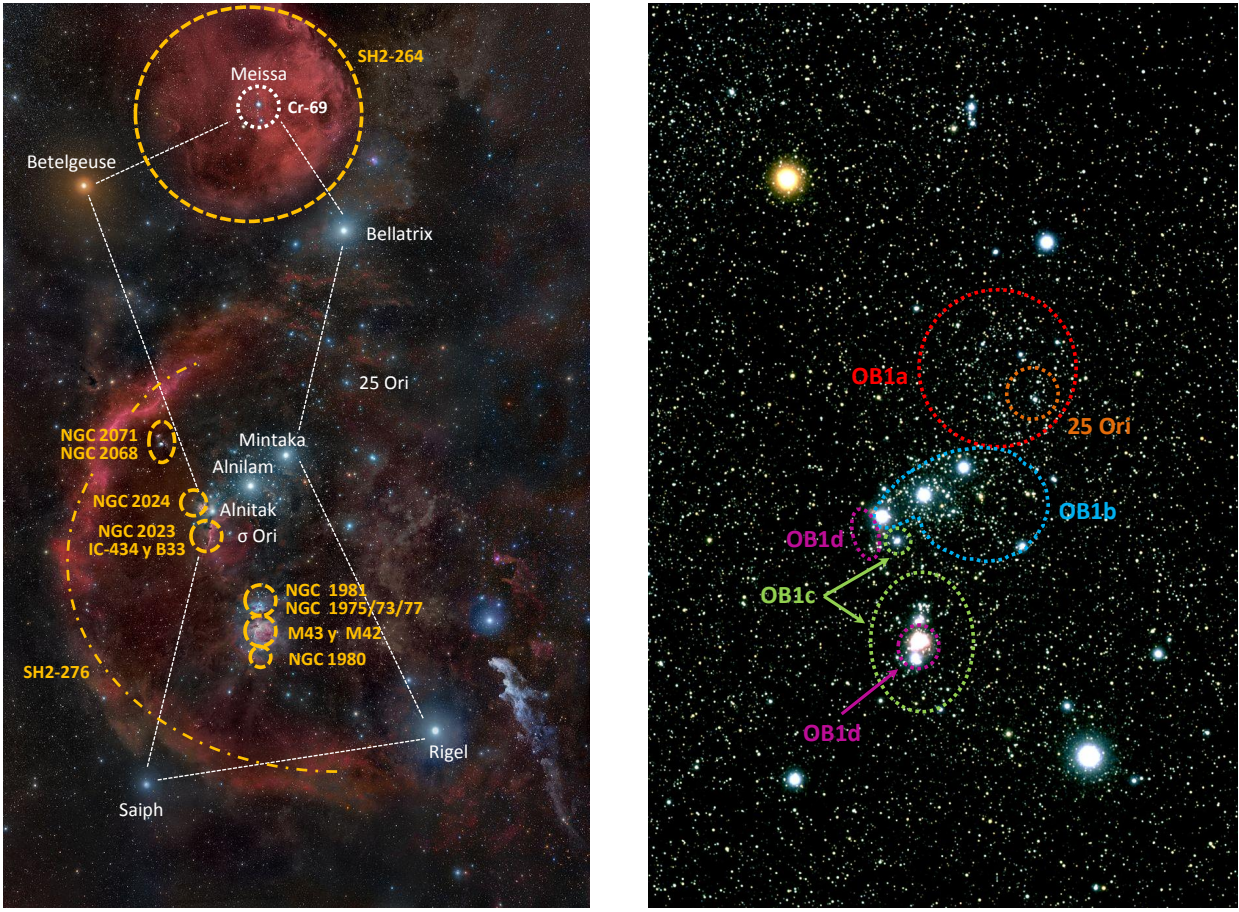


Figura 2.1: *Izda:* Estrellas más brillantes, principales nebulosas y cúmulos estelares en la constelación de Orión. Créditos: Imagen original de Rogelio Bernal Andreo (Deep Sky Colors). *Dcha:* Asociación Estelar OB1 de Orión. Créditos: Imagen original de ESA/Hubble (Akira Fujii).

Las **estrellas más brillantes** que forman esta constelación (ver Fig. 2.1, *izda.*) son^{I,II} : (i) *Betelgeuse* (α Ori, M2Iab), es una supergigante roja variable cuyo brillo fluctúa entre 0.3 – 1.2 mag. Se encuentra a 197 ± 45 pc de distancia del Sol (Harper, Brown & Guinan 2008). (ii) *Rigel* (β Ori, B8Iab) de 0.18 mag, es una supergigante azul muy luminosa. Se encuentra a una distancia de 245 ± 45 pc del Sol. *Rigel* es una estrella binaria, y a su vez, su compañera *Rigel B*, de 6.7 mag, también es una estrella binaria (ambas de la secuencia principal). (iii) *Bellatrix* (γ Ori, B2III) es una supergigante azul de tipo variable, cuyo brillo varía entre 1.59 – 1.6 mag. Está situada a tan solo 75 pc del Sol y no se formó en el Complejo de Orión. (iv) *Mintaka* (δ Ori, O9.5II + B1V + B0IV), *Alnilam* (ϵ Ori,

B0Ia, 1.64 – 1.74 mag) y *Alnitak* (ζ Ori, O9.5Iab + B1IV + B0III) forman el conocido Cinturón de Orión. Todas forman parte de un cúmulo abierto catalogado como Collinder 70 (Cr–70), y también se considera parte de la asociación estelar OB1 de Orión, pertenecientes al grupo OB1b (la Asociación Estelar OB1 de Orión se describe más adelante). (v) *Saiph* (κ Ori, B0.5Ia) de 2.0 mag, es una supergigante azul. Se encuentra a una distancia de 220 ± 45 pc del Sol. (vi) *Meissa* (λ Ori, O8III + B0.5V) es una estrella binaria. La estrella más brillante, de 3.4 mag, es una gigante azul de tipo espectral O8III. La otra componente, de 5.6 mag, es de tipo espectral B0.5V. *Meissa* forma parte del cúmulo estelar Cr–69. Está rodeada por el Anillo Molecular Lambda Orionis (SH2-264; ver Sección 2.3).

^I<http://simbad.u-strasbg.fr/>

^{II}Catálogo de Hipparcos, Perryman et al. 1997

Se conoce como **Asociación Estelar OB1 de Orión** (Blaauw 1964, Brown 1994) a un grupo compuesto de estrellas jóvenes de diferentes edades, principalmente estrellas de tipo espectral O y B, localizados en dirección a esta constelación (ver Fig. 2.1, *izda.*). Esta asociación es la más estudiada de todas y se relaciona con el Complejo de Orión donde se está produciendo una activa formación estelar. La asociación estelar OB1 de Orión se divide principalmente en cuatro grupos según el rango de edad de las estrellas que lo forman:

■ **Orión OB1a.** Es el grupo de estrellas más antiguo, con una edad media entre $8 - 12 \times 10^6$ años. Abarca una extensa área de estrellas situadas entre *Mintaka* y *Bellatrix* (e.g. Blaauw 1991, Brown et al. 1994).

■ **Orión OB1b.** Contiene a las estrellas del área del Cinturón de Orión, principalmente el cúmulo abierto Cr-70, y tienen una edad inferior a 8×10^6 años.

■ **Orión OB1c.** Abarca a las estrellas situadas a 4° debajo del Cinturón de Orión (exceptuando M42 y M43) y tienen edades comprendidas entre $2 - 6 \times 10^6$ años. Contiene los cúmulos estelares NGC 1980 y NGC 1981 y las estrellas que iluminan las nebulosas de reflexión NGC 1973 y NGC 1975. También se incluyen dentro de este grupo las estrellas en torno a σ Ori ya que tienen edades entre $2 - 4 \times 10^6$ años (e.g. Walter et al. 1997, 2008).

■ **Orión OB1d.** Contiene a las estrellas más jóvenes de la región de Orión, con edades $< 2 \times 10^6$ años, abarcando M42, M43, NGC 1977, las regiones moleculares OMC-1, OMC-2 y OMC-3 y una docena de cúmulos más pequeños (e.g. NGC 2068 y NGC 2071; Gibb et al. 2008) y algunas estrellas aisladas. También forma parte del grupo OB1d el cúmulo NGC 2024 (e.g. Meyer et al. 2008). El **Cúmulo de la Nebulosa de Orión** (ONC, *Orion Nebula Cluster*), que ilumina a la nebulosa M42, lo forman ~ 2300 estrellas jóvenes formadas hace $\sim 1 \times 10^6$ años dentro de un radio de 2.06 pc y una masa estelar total de $\sim 1800 M_\odot$ (Hillenbrand 1997, Hillenbrand & Hartmann 1998, Muench et al. 2008, O'Dell et al. 2008). Las cuatro estrellas más brillantes del cúmulo forman el sistema θ^1 Ori del Trapecio, que toma su nombre del asterismo que forman sus cuatro estrellas más brillantes. En la Fig. 2.2 se muestra una imagen del cúmulo y las propiedades más importantes de estas cuatro estrellas. La estrella más masiva, θ^1 Ori C, de tipo espectral O7V (Stahl et al. 2008), produce el $\sim 80\%$ de los fotones ionizantes, mientras que la segunda estrella más masiva, θ^1 Ori D, de tipo espectral O9.5V, produce el $\sim 15\%$ de los fotones ionizantes. La radiación UV emitida por las estrellas masivas jóvenes del Trapecio iluminan la nube molecular OMC-1 (ver Sección 2.3 y 2.4).

Los grupos OB1c y OB1d se superponen parcialmente a lo largo de nuestra línea de visión (e.g. Warren & Hesser 1978, Gomez & Lada 1998, Alves & Bouy 2012, Bouy

Estrella	Tipo Espectral	T_{eff} [K]	L [$10^5 L_\odot$]
θ^1 Ori C	O7V	36900	1.4
θ^1 Ori D	O9.5V	31880	0.48
θ^1 Ori A	B0.5V	28100	0.4
θ^1 Ori B	B3V	17900	0.017

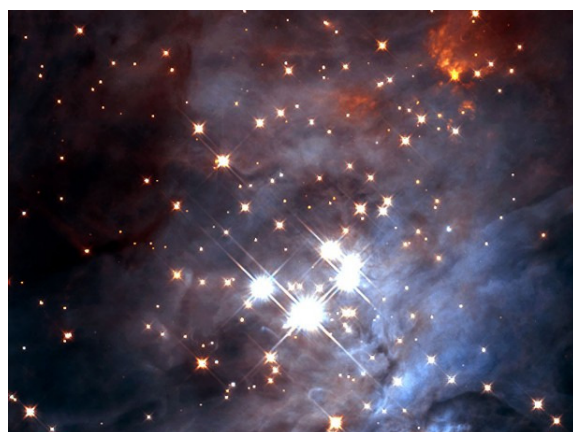


Figura 2.2: *Izda:* Tipo espectral, temperatura efectiva y luminosidad de las estrellas del Trapecio (Draine 2011). *Dcha:* Imagen del cúmulo del Trapecio realizada con la cámara IR NICMOS del Telescopio Espacial Hubble. Créditos: K.L. Luhman (Harvard-Smithsonian Center for Astrophysics) y G.Schneider, E.Young, G.Rieke, A.Cotera, H.Chen, M.Rieke, R.Thompson (Steward Observatory) y NASA/ESA.

& Alves 2014, Muench et al. 2008). El grupo OB1c se encuentra delante de la parte norte de Orión A y de la Nebulosa de Orión. La ausencia de iluminación o reflexión en la superficie de la nube molecular de Orión A que pueda atribuirse a estrellas masivas del grupo OB1c implica que este grupo más antiguo debe estar al menos a ~ 10 pc delante de Orión A (las nubes moleculares de Orión A y Orión B se describen en la Sección 2.3).

Recientemente se ha descubierto un grupo de ~ 200 estrellas de baja masa de la secuencia pre-principal concentradas dentro de 1° alrededor de la estrella 25 Ori, de tipo espectral B1V, en el extremo noroeste del Cinturón de Orión. Sus estrellas tienen edades comprendidas entre $7 - 10 \times 10^6$ años. Aunque oficialmente forman parte del grupo OB1a, estas estrellas tienen una velocidad radial distinta, $\sim 10 \text{ km s}^{-1}$ menor que las estrellas que pertenecen al grupo OB1b y $\sim 4 \text{ km s}^{-1}$ que las del grupo OB1a, por lo que se piensa que el grupo 25 Ori representa un grupo intermedio entre OB1a y OB1b (Briceño et al. 2007).

Los grupos estelares de mayor edad (OB1a y OB1b) están a menor distancia de nosotros ($320 - 400$ pc; Brown et al. 1994, 1995) que los más jóvenes (OB1c y OB1d), ya que recientes observaciones interferométricas revelan

que la Nebulosa de Orión se encuentra a una distancia entre $389 - 437$ pc (437 ± 19 pc, Hirota et al. 2007; 389 ± 23 pc, Sandstrom et al. 2007; 414 ± 7 pc, Menten et al. 2007). Esto sugiere que la formación estelar se propagó a lo largo de la nube de una manera secuencial, de este modo las estrellas de primera generación activan la formación de generaciones estelares posteriores. Se piensa que el primer grupo de estrellas que se formó en Orión fue OB1a y que indujo el nacimiento de los grupos 25 Ori y OB1b. A continuación se formó el grupo OB1c al sur del Cinturón de Orión y el cúmulo estelar de σ Ori. Dentro de los últimos millones de años, la formación de estrellas se propagó en la nube molecular Orión A para formar la Nebulosa de Orión, M43, OMC-2, OMC-3 y NGC 1977, pertenecientes al grupo OB1d, situados detrás de OB1c. La formación estelar reciente también activó el nacimiento de estrellas al este del grupo OB1b y de σ Ori para dar lugar a NGC 2023, NGC 2024, NGC 2068 y NGC 2071. Además de estos cúmulos estelares, se están formando numerosos grupos estelares más pequeños a partir de docenas de nubes moleculares dispersas por el interior del Complejo de Orión. La formación de estrellas masivas continua hoy en día en la densa nube molecular OMC-1 (en el *ridge* extenso de Orión KL y Orión S) justo detrás de la Nebulosa de Orión.

2.3. Medio Interestelar de la región de Orión

Dentro del Complejo de Orión se incluyen numerosos objetos de gran interés astrofísico, como regiones HII, nebulosas de emisión, nebulosas de reflexión y nebulosas oscuras que se han visto influidas por los efectos combinados de la radiación UV estelar, vientos estelares y explosiones de supernova. Entre las **nebulosas más estudiadas** de esta región destacan:

■ **La Nebulosa de Orión** (M42, NGC 1976) es la región HII densa más cercana, a una distancia de sólo 414 ± 7 pc (Menten et al. 2007; Fig. 2.3–A/B), ionizada por el Cúmulo de Nebulosa de Orión (ver Sección 2.2). Se han observado en su interior objetos Herbig-Haro (e.g. Bally et al. 2001; Fig. 2.3–C), *proplyds* (e.g. McCaughrean 1997; Fig. 2.3–D), enanas marrones (e.g. Stassun et al. 2006), fuertes turbulencias (e.g. Orkisz et al. 2017), regiones de

fotodisociación cerca de estrellas masivas (e.g. la Barra de Orión, ver Capítulo 5), etc. Gracias a su cercanía se han podido realizar observaciones de alta resolución angular que han permitido comprender mejor las regiones HII (ver revisión de O'Dell 2001).

■ **La Nebulosa de Mairan** (M43 o NGC 1982). Se encuentra a $7'$ al norte del cúmulo del Trapecio y está separada de M42 por una línea oscura de polvo (Fig. 2.3–A). Es una región HII de simetría aproximadamente esférica de $\sim 4'$ de diámetro. En el centro de la nebulosa se han identificado tres componentes estelares (Abt et al. 1991, Preibisch et al. 1999), siendo una estrella variable de tipo B0.5V (HD 37061) la principal fuente de ionización de la nebulosa (Simón-Díaz et al. 2011).

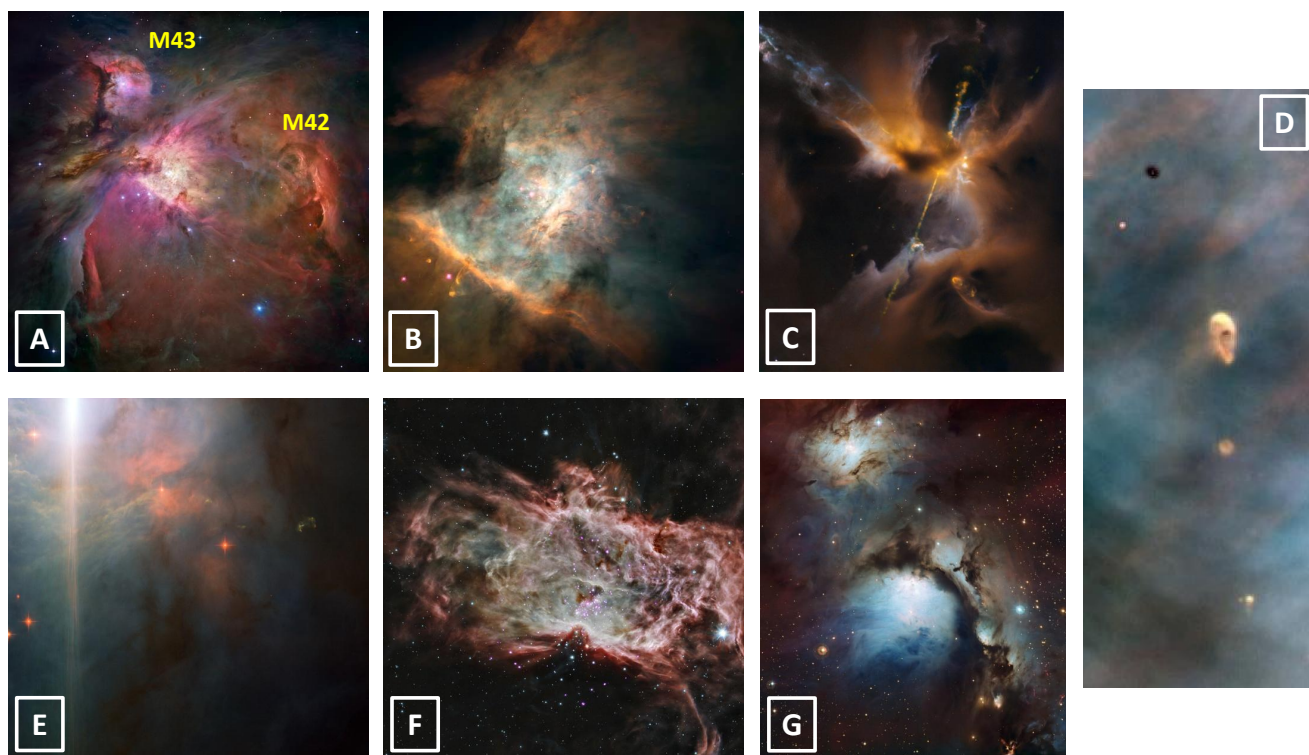


Figura 2.3: Imágenes de varias nebulosas y objetos estelares dentro del Complejo de Orión. **A.** Imagen de la Nebulosa de Orión (M42) y la Nebulosa de Mairan (M43) realizada con el Telescopio Espacial Hubble (HST, *Hubble Space Telescope*). Créditos: NASA, ESA, M.Robberto (Space Telescope Science Institute/ESA) y HST Orion Treasury Project Team. **B.** Interior de M42 (HST). En el centro de la imagen se localizan las estrellas de Trapecio y en la parte inferior izquierda la Barra de Orión. Créditos: NASA, C.R.O'Dell, S.K.Wong (Rice University). **C.** Imagen en IR del objeto Herbig-Haro HH 24 en Orión B (HST). Créditos: NASA, ESA, Hubble Heritage (STScI/AURA)/Hubble-Europe collaboration. **D.** Imagen de cinco *proplyds* en la Nebulosa de Orión (HST). Créditos: C.R.O'Dell (Rice University) y NASA. **E.** Nebulosa de reflexión NGC 2023 (HST). Créditos: ESA/Hubble y NASA. **F.** Nebulosa de la Flama. Combinación de imágenes obtenidas en RX con el telescopio Chandra (en púrpura) y en IR con el Telescopio Espacial Spitzer (en rojo, verde y azul). Créditos: RX: NASA/CXC/PSU/K.Getman, E.Feigelson, M.Kuhn y MYStIX; IR: NASA/JPL-Caltech. **G.** Imagen de la nebulosa NGC 2068 tomada con el telescopio MPG/ESO en el observatorio de La Silla. Créditos: ESO/I.Chekalin.

■ **IC 434 y la Nebulosa Cabeza de Caballo.** La Nebulosa Cabeza de Caballo también conocida con el nombre científico B33 en el catálogo de Barnard (1919), es una nebulosa de absorción, una nube de gas fría y oscura (ver Fig. 2.4). Es uno de los objetos más famosos y fácilmente reconocibles en el cielo debido a su peculiar morfología. Esta nebulosa oscura es visible debido a que está situada delante de la emisión brillante en $H\alpha$ de la región HII IC 434. A longitudes de onda IR y de radio, Cabeza de Caballo es brillante debido a la emisión del polvo y a la emisión molecular. Esta nube de gas y polvo está iluminada principalmente por σ Ori, un sistema estelar múltiple de tipo

espectral O9.5V (Warren & Hesser 1977) que se encuentra a una distancia lineal proyectada de 3.5 pc y tiene una temperatura efectiva de ~ 34600 K (Schaerer & de Koter 1997). El campo de radiación que incide sobre esta nebulosa ($G_0 \approx 100$ en unidades de Habing; ver Capítulo 3) comprime y calienta el gas y el polvo formando una PDR en el borde occidental (e.g. Pety et al. 2005; Habart et al. 2005; Goicoechea et al. 2006, 2009; Compiègne et al. 2007; Rimmer et al. 2012, Guzmán et al. 2012, 2013, 2014).

■ **NGC 2023** es una nebulosa de emisión y reflexión situada muy cerca de IC 434 y de la Nebulosa Cabeza de Ca-

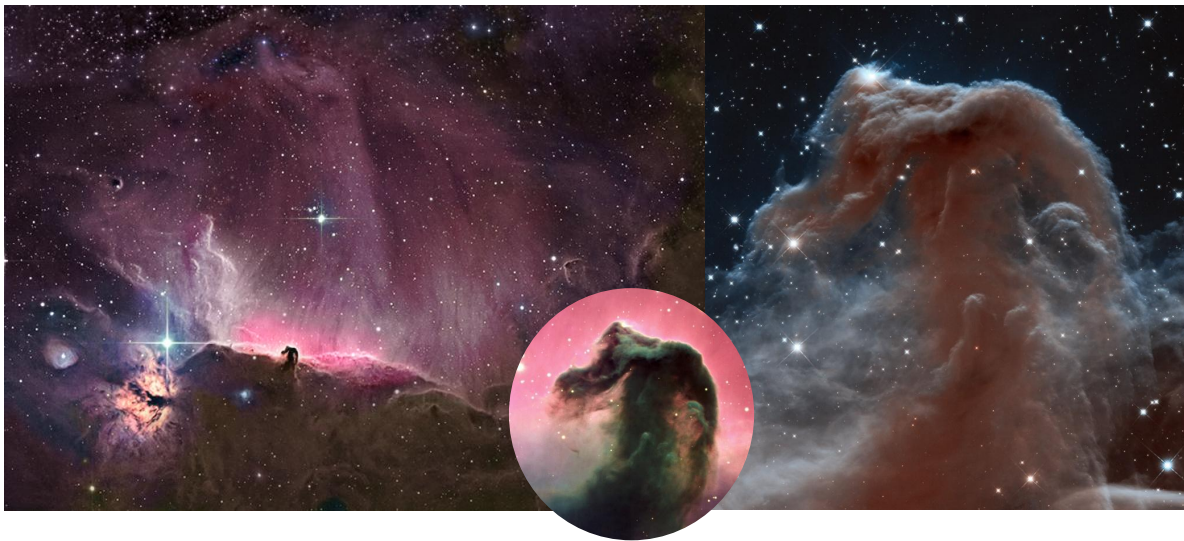


Figura 2.4: *Izda:* Imagen de exposición profunda de las nebulosas Cabeza de Caballo, IC 434, NGC 2024 y NGC 2068. Créditos: Rogelio Bernal Andreo (Deep Sky Colors). *Dcha:* Imagen en NIR de la Nebulosa Cabeza de Caballo realizada con el HST. Créditos: NASA, ESA, y Hubble Heritage Team (STScI/AURA). *Centro:* Imagen en VIS de la Nebulosa Cabeza de Caballo realizada con el VLT. Créditos: ESO.

ballo, y a una distancia del Sol de ~ 450 pc (Fig. 2.3–E). NGC 2023 rodea a una estrella masiva de tipo espectral B1.5V (HD 37903) que es el miembro más luminoso de un grupo de estrellas jóvenes que iluminan la superficie de la nube molecular L1630 en Orión B (Depoy et al. 1990). NGC 2023 forma una cavidad en la superficie de la nube produciendo tanto una brillante nebulosa de reflexión, como una región de fotodisociación. También es una de las fuentes astronómicas más brillantes de hidrógeno molecular fluorescente (Burton et al. 1998).

■ **La Nebulosa de la Flama** (NGC 2024) es una nebulosa de emisión y recibe este nombre por su parecido con una hoguera (Fig. 2.3–F y Fig. 2.4). *Alnilam*, la estrella más brillante del Cinturón de Orión, ilumina esta nebulosa. Está situada a ~ 415 pc (Anthony-Twarog 1982). En el centro de la Nebulosa de la Flama se encuentra un grupo de estrellas recién formadas (con una media de edad de $\sim 0.8 \times 10^6$ años; Konstantin et al. 2014), y una densidad de estrellas muy elevada (~ 400 estrellas pc^{-3} ; Lada 1999). Se ha descubierto que la mayoría de estas estrellas están rodeadas por un disco circunestelar (Haisch et al. 2000). En el artículo de Meyer et al. (2008) se describe de forma detallada esta nebulosa.

■ **NGC 2068** (M78) es una nebulosa de reflexión muy bri-

llante (Fig. 2.3–G). Esta nebulosa contiene dos estrellas de 10 mag. La nube de polvo de M78 refleja la luz de estas estrellas haciéndose visible. En esta nebulosa se han encontrado estrellas en todas las etapas de evolución de la secuencia pre-principal, desde protoestrellas de Clase 0 hasta estrellas de tipo T Tauri, y numerosos objetos Herbig-Haro (e.g. Gibb 2008, Zhao et al. 1999). Forma parte de un grupo de nebulosas que incluye NGC 2064, NGC 2067 y NGC 2071.

■ **El Bucle de Barnard** (Sh2–276) es una nebulosa de emisión que se extiende $600'$ en el cielo. Tiene forma de arco centrado en la Nebulosa de Orión y forma parte de la superburbuja Orión–Eridanus. Se puede ver claramente en imágenes de larga exposición (Fig. 2.1, *izda.*). Está a una distancia de 440 pc (O'Dell & Henney 2008) y tiene una longitud de 110 pc. El Bucle de Barnard está siendo fotoionizado por las estrellas más luminosas de la constelación de Orión, excepto por θ^1 Ori C y θ^1 Ori A, cuya radiación se absorbe localmente casi por completo (O'Dell et al. 2011).

■ **Anillo molecular Lambda Orionis** (SH2–264) y **Coilinder 69** (Cr–69). La estrella *Meissa* forma parte de un cúmulo estelar llamado Cr-69, y se piensa que su formación ($< 5 \times 10^6$ años) está relacionada con la expansión de la burbuja creada por Orión OB1a. Este cúmulo tiene una edad similar al grupo OB1b o a las estrellas más antiguas

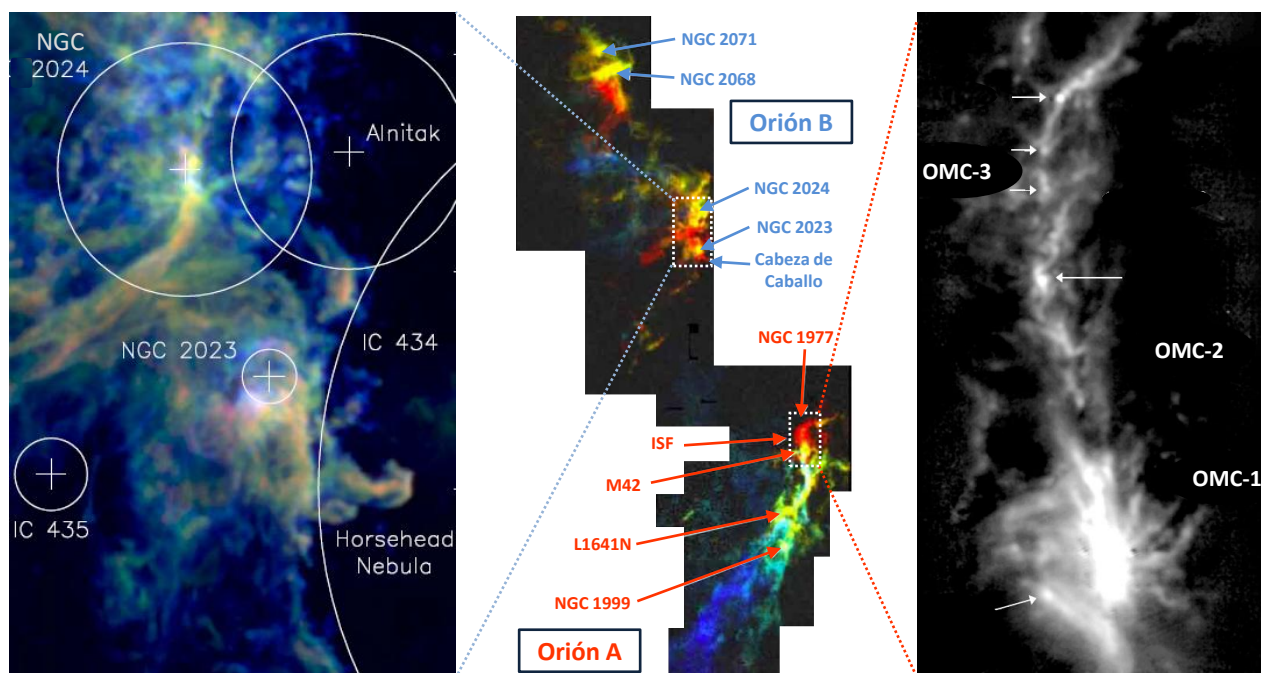


Figura 2.5: *Centro:* Mapa de $^{13}\text{CO } J = 1 \rightarrow 0$ que muestra las nubes moleculares de Orión A y Orión B. En escala de colores se representan las distintas velocidades v_{LSR} de la nube: $v_{\text{LSR}} = 0 - 5 \text{ km s}^{-1}$ representado por el color azul, $v_{\text{LSR}} = 5 - 10 \text{ km s}^{-1}$ en verde, y $v_{\text{LSR}} = 10 - 15 \text{ km s}^{-1}$ en rojo. Créditos: Imagen original de Bally et al. 2008. *Izda:* Imagen compuesta de la emisión de CO (azul), ^{13}CO (verde), C^{18}O (rojo) $J = 1 \rightarrow 0$ de Orión B. Los círculos muestran las extensiones típicas de las regiones HII y las cruces señalan la posición de las estrellas ionizantes asociadas. La estrella σ -Ori que ioniza la región HII IC 434 está a 0.5° al este de la Nebulosa Cabeza de Caballo. Esta región está señalada con un rectángulo de líneas discontinuas en la figura del centro. Créditos: Imagen original de Pety et al. 2017. *Dcha:* Imagen de la emisión del polvo en continuo ($850 \mu\text{m}$) de las nubes moleculares gigantes OMC-1/2/3 (rectángulo de líneas discontinuas en la figura del centro). Los autores señalan con flechas las regiones estudiadas. Créditos: Imagen original de Johnstone et al. 2003.

de OB1c. *Meissa* está rodeada por una región HII y nubes moleculares oscuras donde se produce formación estelar (Fig. 2.1, *izda.*). Esta nebulosa lleva el nombre de su estrella principal, λ Ori, una gigante azul responsable de la ionización del material circundante. La distribución espacial y de edad de las estrellas de este cúmulo muestran que la formación estelar se produjo originalmente en una nube molecular gigante alargada, con las estrellas más masivas formándose en un núcleo central denso. Se piensa que la explosión de una supernova fue el mecanismo que finalizó la formación de estrellas en ese núcleo y formó el anillo circundante (Mathieu 2008).

Todas estas nebulosas (excepto Sh2-264 y Sh2-276) están contenidas dentro de dos **nubes moleculares gigantes**. Los mapas a gran escala del Complejo de Orión (e.g. Lynds

1962, Tucker et al. 1974, Maddalena et al. 1986, Bally 2008, Megeath et al. 2012) revelan una emisión molecular extensa en la que se diferencian dos complejos moleculares distintos, Orión A y Orión B, que coinciden con las nubes oscuras (Lynds) detectadas en la región. Tienen una masa total superior a $2 \times 10^5 M_\odot$ y un tamaño de 29 y 19 grados², respectivamente (Grenzel et al. 1989, Wilson et al. 2005). Ambas nubes moleculares gigantes se localizan en el interior de la superburbuja de Orión-Eridanus (Maddalena et al. 1986, Bally et al. 1987, 1991a,b). En la Fig. 2.5 (*izda.*) se muestra un mapa de $^{13}\text{CO } J = 1 \rightarrow 0$ a gran escala del Complejo de Orión (Bally 2008) donde se distinguen los dos complejos.

■ **Orión A** (complejo molecular sur), paralelo al Plano Galáctico, contiene, entre otros, la Nebulosa de Orión, el Cúmulo de Nebulosa de Orión, M43, NGC 1977 y las nu-

bes oscuras L1640, L1641 y L1647 (Allen & Davis 2008, Kutner et al. 1977). En el extremo norte del compejo hay una nube molecular compacta de gas denso conocido como “filamento con forma de integral” (ISF, *Integral-Shaped Filament*) donde se está produciendo una activa formación estelar. Este filamento se divide en en tres nubes de material neutro (ver Fig. 2.5, *dcha.*): (i) La nube molecular de Orión 1 (OMC–1, *Orion Molecular Cloud–1*), a $\sim 1'$ al noreste del Trapecio, se encuentra detrás de la región HII de la Nebulosa de Orión (ver Fig. 2.6). OMC–1 contiene dos regiones donde se están formando estrellas de alta masa y de masas intermedias: la región Becklin–Neugebauer / Kleinmann–Low (BN/KL; e.g. Kleinmann & Low 1967, Blake et al. 1987, Tercero et al. 2010, 2011) y Orión S,

un núcleo molecular aislado situado dentro de la cavidad de gas ionizado frente a OMC–1 (e.g. O’Dell et al. 2009). (ii) OMC–2 y (iii) OMC–3 están situados a $\sim 12'$ y $\sim 16'$ al noreste del Trapecio, respectivamente. Son regiones de formación estelar muy jóvenes y tienen una emisión IR y molecular muy brillante.

■ **Orión B** (complejo molecular norte) contiene a las nebulosas NGC 2023, 2024, 2068, 2071 y Cabeza de Caballo, las nubes oscuras L1622 y L1630, y los cúmulos de estrellas jóvenes de esta región (e.g. Lada et al. 1991, Chen & Tokunaga, 1994, Allen et al. 2008, Meyer et al. 2008, Flaherty & Muzerolle 2008, Reipurth et al. 2008, Bally et al. 2009, Pety et al. 2017).

2.4. Interacción de la radiación FUV con la materia

Como ya se ha mencionado en la Sección 2.1, el Complejo de Orión alberga la región de formación de estrellas masivas más cercana (~ 414 pc; Menten et al. 2007). Las estrellas masivas (estrellas tipo O y B, con masas $> 8 M_{\odot}$) tienen un impacto dramático sobre el medio interestelar que las rodea. Emiten fotones UV extremos ($h\nu > 13.6$ eV) que ionizan todo el gas circundante formando regiones HII. Además, los fotones UV lejanos (FUV: $6 \text{ eV} < h\nu < 13.6 \text{ eV}$) penetran más allá de la región HII e influyen en la dinámica, el balance energético y la química del medio interestelar neutro (regiones HI) y nubes moleculares. Por lo tanto, desde una perspectiva global, los procesos foto-inducidos que tienen lugar en ambientes iluminados por radiación FUV reflejan la retroalimentación radiativa de estas estrellas. Esta retroalimentación tiene lugar en diferentes escalas espaciales de la Vía Láctea, en otras galaxias con formación estelar, y en distintas épocas cosmológicas. En particular, el estudio de la interacción entre la radiación FUV y la materia interestelar contribuye a una mejor comprensión de una amplia gama de objetos y entornos en nuestra galaxia: el medio interestelar difuso, las interfases entre las nubes moleculares y las regiones HII, los halos de gas molecular pobres en CO (CO–*dark* H₂ gas, regiones donde el hidrógeno está en forma molecular pero no hay emisión de CO), nebulosas de reflexión o *proplyds* (Hollenbach & Tielens 1999). Las PDRs son de gran importancia porque en ellas se produce la conversión del medio

interestelar atómico al molecular (las zonas de transición H⁺/H/H₂ y C⁺/C/CO; ver Capítulo 3).

OMC–1 es probablemente la región de formación de estrellas masivas más profusamente estudiada de la galaxia. La radiación UV emitida por las estrellas masivas del Trapecio (ver Sección 2.2) ilumina la nube molecular OMC–1 (el Trapecio se sitúa a ~ 0.3 pc delante de la nube molecular; e.g. Bally 2008). La mayor parte de la emisión proviene de una región con un diámetro angular de $\sim 4'$ (~ 0.5 pc; Felli et al. 1993). Así, una región de varios parsecs está expuesta a flujos de radiación FUV mucho más altos que el promedio de G_0 en la Vía Láctea (e.g. Stacey et al. 1993, Luhman et al. 1994, Rodríguez-Franco et al. 1998). Las estrellas del Trapecio han creado una región HII que limita con la nube molecular OMC–1. Una de las interfases entre la región HII y OMC–1 es una región de fotodisociación conocida como la Barra de Orión (Capítulo 5), la barra brillante que se puede ver en las imágenes de luz visible (Fig. 2.3–B).

Goicoechea et al. (2015) cartografiaron la región de OMC–1 a través de la línea de estructura fina del carbono ionizado, [CII] $158 \mu\text{m}$ ($^2P_{3/2} - ^2P_{1/2}$; $\Delta E_{u/k} \simeq 91.2$ K). Es una de las líneas de enfriamiento más importantes del medio interestelar neutro y frío (Dalgarno & McCray 1972; Sección 1.4.3.1) y una de las líneas más brillantes de las regiones de fotodisociación. El átomo de carbono neutro tiene

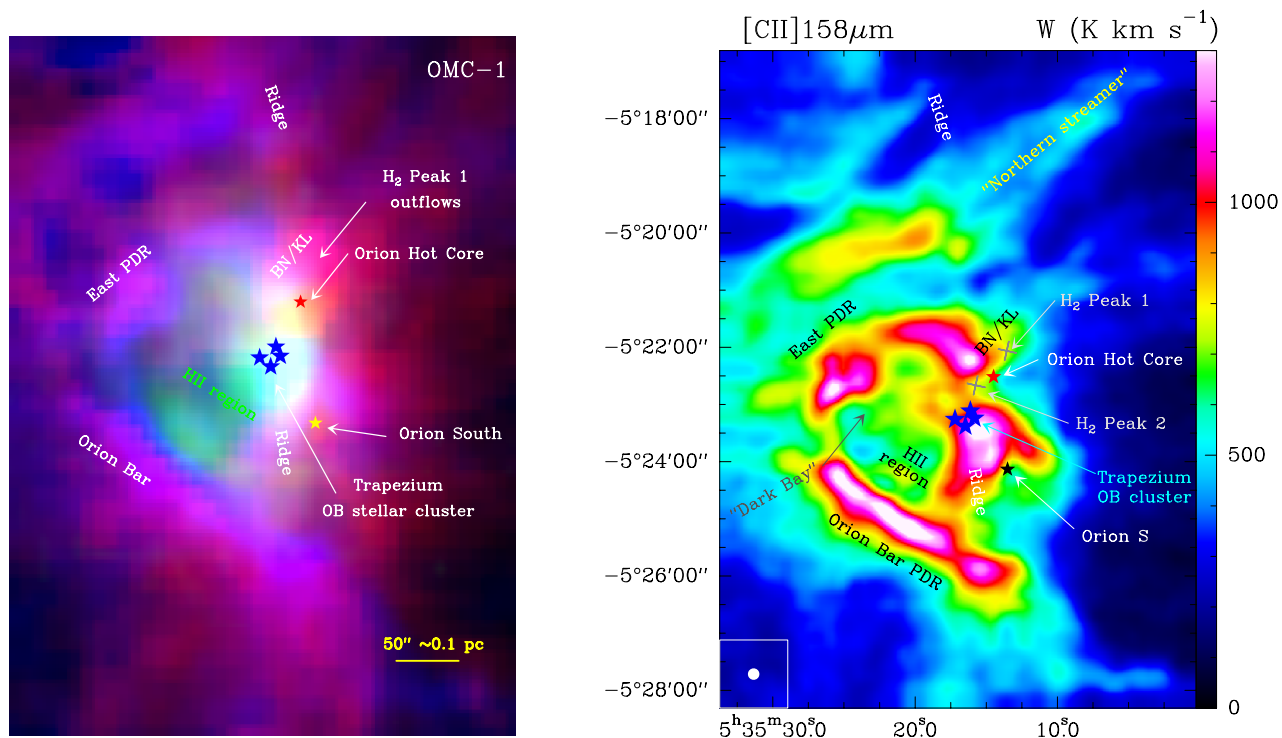
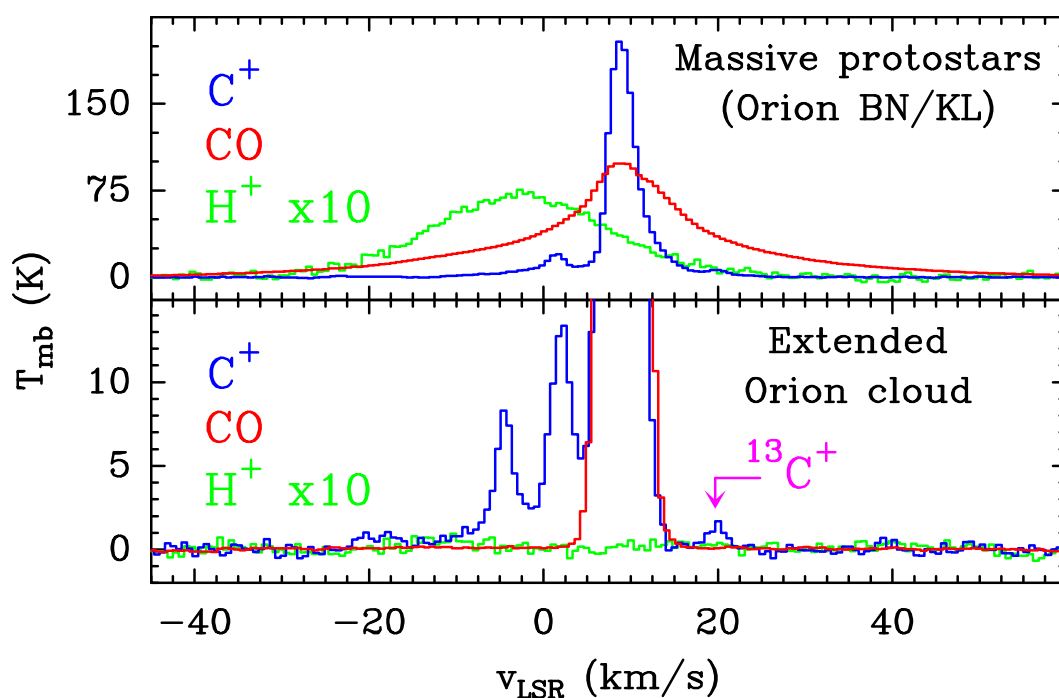


Figura 2.6:

158 μm observada con Herschel/HIFI [*Ida.*]: Imagen en múltiples longitudes de onda de la nube molecular gigante OMC-1. En verde se muestra la intensidad integrada de la línea H41 α , en azul [CII] 158 μm , y en rojo CO 2 \rightarrow 1. Se muestran las posiciones de las regiones más importantes de OMC-1. *Dcha.*: Mapa de la intensidad integrada de la línea [CII] 158 μm (en K km s^{-1}) observada con Herschel/HIFI entre $v_{\text{LSR}} = -30 - +30 \text{ km s}^{-1}$ (Goicoechea et al. 2015).

Figura 2.7: Variedad de perfiles de las líneas de CO, C⁺ y H⁺ en la nube molecular OMC-1.

un potencial de ionización de 11.3 eV, por lo que el ion C^+ traza la transición $H^+/H/H_2$ en las PDRs. Sólo esta línea produce entre $\sim 0.1 - 1\%$ de la luminosidad FIR total de las galaxias (Crawford et al. 1985). Los barridos espectrales de líneas resueltas en velocidad muestran que la contribución promedio de la emisión de $[CII]$ en la Vía Láctea es: 55% – 75% del gas H_2 iluminado por fotones FUV, 20% – 25% del gas atómico frío y 5% – 20% del gas ionizado HII (Pineda et al. 2013, 2014).

En la Fig. 2.6 (*izda.*) se muestra una imagen compuesta de OMC–1 de la emisión integrada de línea de $CO\ 2 \rightarrow 1$ (rojo), $[CII]\ 158\ \mu m$ (azul) y $H41\alpha$ (verde). Esta imagen muestra la estratificación de HII / PDR / gas molecular es-

perada en nubes moleculares irradiadas por fuertes campos UV procedentes de estrellas masivas cercanas. La línea de recombinación $H41\alpha$ traza el gas ionizado denso de la región HII alrededor del Trapecio, la línea de $[CII]\ 158\ \mu m$ las regiones de fotodisociación y el $CO\ 2 \rightarrow 1$ el gas molecular. En la Fig. 2.6 (*dcha.*) se muestra un mapa de la intensidad integrada de la línea $[CII]\ 158\ \mu m$ (en $K\ km\ s^{-1}$) observada con Herschel/HIFI entre $v_{LSR} = -30 - +30\ km\ s^{-1}$. Las regiones más brillantes en $[CII]$ delimitan los bordes de la región HII , con picos de emisión cerca del Trapecio, al este de Orión BN/KL (*East PDR*), y a lo largo de la Barra de Orión. La Fig. 2.7 muestra la variedad de perfiles de línea observados en esta región.

Capítulo 3

Regiones de fotodisociación

3.1. Presentación general

Las regiones de fotodisociación (PDRs, *Photodissociation Regions*), son las zonas de transición entre el gas caliente atómico e ionizado iluminado por intensos campos de radiación UV (e.g. regiones HII), y el gas frío y neutro (moléculas en su mayoría) que se encuentra protegido de la radiación (e.g. condensaciones pre-estelares). En estas regiones, la radiación FUV incidente (fotones con energías entre $6\text{ eV} < h\nu < 13.6\text{ eV}$) condiciona fuertemente el estado químico del gas y del polvo interestelar (e.g. Hollenbach & Tielens 1997, Hollenbach & Tielens 1999). En las PDRs tiene lugar la transición entre el gas atómico y molecular (transiciones H/H_2 y $\text{C}^+/\text{C}/\text{CO}$) por lo que son regiones muy importantes para la comprensión del medio interestelar y circunestelar. Con esta definición genérica, la mayor parte del gas atómico de la galaxia se encuentra en las regiones de fotodisociación (Hollenbach & Tielens 1999, Tielens 2005). Además, la mayor parte de la masa de las nubes moleculares está en regiones con $A_V < 8\text{ mag}$ donde, por ejemplo, los fotones FUV aún influyen en la química del oxígeno y en el balance de ionización. Por lo tanto, en base a los procesos físicos y químicos dominantes, la mayor parte de la masa del medio interestelar se encuentra en regiones de fotodisociación.

Las regiones de fotodisociación se encuentran en muchos entornos astrofísicos y a muchas escalas espaciales. Son ejemplos de PDRs: (i) las regiones cercanas a estrellas masivas tipo OB dentro de una nube molecular (e.g. Stacey

et al. 1993), (ii) las zonas superficiales de las nubes moleculares que están siendo irradiadas por el campo UV interestelar (ISRF, *InterStellar Radiation Field*; e.g. Stutzki et al. 1988), (iii) las nebulosas planetarias (e.g. Graham et al. 1993), en donde la estrella enana blanca emite intensamente en el UV, (vi) los núcleos de galaxias con brotes de formación estelar (e.g. Fuente et al. 2008), (v) los *proplyds* (e.g. O'Dell 1998, O'Dell et al. 2008), (vi) las envolturas circunestelares en torno a estrellas evolucionadas (estrellas AGB o gigantes rojas), y (vii) las nubes del medio interestelar difuso (e.g. Gerin et al. 2011). Estos ambientes tan diferentes muestran una química particular inducida por una activa fotoquímica, y comparten características comunes en el sentido de que su física (cinemática, termodinámica) y su química (disociación e ionización del gas, foto-procesamiento del polvo) están determinadas por la presencia de campos FUV intensos. Los procesos físicos y químicos que ocurren en las PDRs interestelares permiten estudiar la interacción entre las estrellas masivas que generan las regiones HII con el medio interestelar que las rodea, y por lo tanto, son necesarios para comprender la evolución del medio interestelar de nuestra galaxia y de los objetos más distantes.

Las regiones de fotodisociación son de gran interés ya que al tener una química controlada por la fotoionización, fotodisociación y presencia de H_2 vibracionalmente excitado, se producen especies peculiares como radicales (C_2H , OH , $\text{HCO}\dots$) e iones reactivos (SH^+ , CO^+ ,

CH^+ , HOC^+ ...; e.g. Sternberg et al. 1995, Goicoechea et al. 2017). Estas especies son extremadamente reactivas y por lo tanto altamente inestables bajo las condiciones físicas de la Tierra. Las PDRs también son un laboratorio que posee las

condiciones físicas ideales para el descubrimiento de nuevas especies químicas que permitirán establecer los límites de la complejidad química en el espacio.

3.2. Estructura de las PDRs

De forma esquemática, las PDRs se dividen en zonas o capas en función de la extinción visual (A_V ; $N_H = 1.9 \times 10^{21} A_V [\text{cm}^{-2} \text{mag}^{-1}]$), desde el límite de la región HII (frente de ionización, $A_V < 0.01 \text{ mag}$) donde el gas está principalmente en estado atómico no ionizado (HI), hasta la nube molecular densa y fría, donde la mayoría de las especies condensan en hielos ($A_V > 10 \text{ mag}$; Sternberg & Dalgarno 1995, Hollenbach & Tielens 1997, Hollenbach & Tielens 1999, Lebrón et al. 2003).

En la Fig. 3.1 se muestra un esquema unidimensional de la estratificación de una PDR fuertemente irradiada en función de la extinción visual. Los fotones FUV procedentes de estrellas calientes penetran en la nube molecular ionizando,

disociando y calentando el gas. A continuación se describen en detalle las diferentes zonas de transición de una PDR, incluyendo las dos zonas adyacentes, las regiones HII y las nubes moleculares. Las profundidades a las que se produce cada transición son aproximadas, y dependen del campo de radiación FUV incidente y de la densidad de la nube (ver Sección 3.4.1.2).

■ **Región HII:** En la vecindad de estrellas masivas, una PDR está precedida de una región donde el gas está ionizado. Las estrellas masivas (estrellas tipo O y B con masas $> 8 M_\odot$) emiten fotones UV extremos ($h\nu > 13.6 \text{ eV}$) que ionizan el gas a su alrededor creando una esfera de Strömgren, o región HII (de hidrógeno ionizado, HII o H^+), en

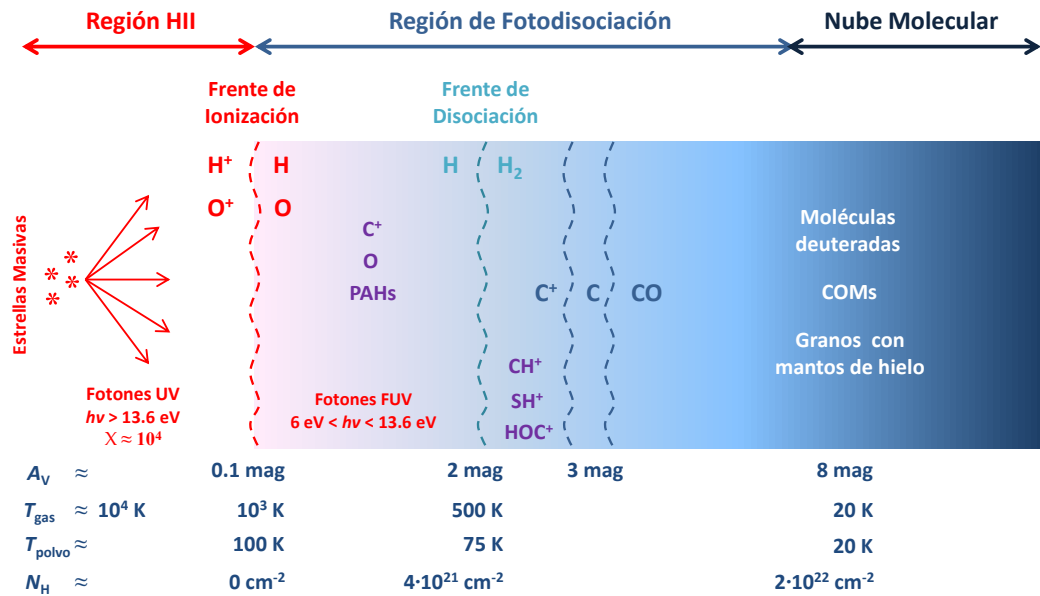


Figura 3.1: Esquema unidimensional de la estratificación de una PDR iluminada por un campo FUV intenso en función de la extinción visual. La radiación UV ionizante (procedente, por ejemplo, de estrellas OB cercanas o del campo de radiación interestelar) incide por el lado izquierdo del esquema sobre una nube predominantemente neutra. Los fotones con energía $> 13.6 \text{ eV}$ son absorbidos en la región HII y en la interfase H^+/H de la nube. A medida que la extinción visual y la columna de densidad aumentan (de izquierda a derecha), la intensidad del campo de radiación, la ionización y la temperatura disminuyen dando lugar a la estratificación química y física observada en las PDRs.

Tabla 3.1: Parámetros estelares de estrellas tipo O y B.

Tipo	T_{eff}^a	L^b	N_{Lyc}^c	\mathcal{R}_s^d
Espectral	[K]	[$10^5 L_{\odot}$]	[10^{49} fotones s^{-1}]	[pc]
O3	51200	10.8	7.4	1.3
O4	48700	7.6	5.0	1.2
O5	46100	5.3	3.4	1.0
O6	43600	3.7	2.2	0.88
O7	41000	2.5	1.3	0.75
O8	38500	1.7	0.74	0.62
O9	35900	1.2	0.36	0.49
B0	33300	0.76	0.14	0.36

Notas. ^a Temperatura efectiva; ^b luminosidad; ^c número de fotones ionizantes emitidos por la estrella;

^d radio de Strömgren calculado para una densidad de 10^3 cm^{-3} . Tabla obtenida de Tielens (2004).

torno a la estrella (ver Tabla 3.1). Los fotones con una energía mayor que el potencial de ionización del hidrógeno (13.6 eV) son absorbidos en la región HII por lo que todos los átomos de hidrógeno se mantienen ionizados.

■ **Frente de Ionización:** Se considera la superficie de una PDR ($A_v \simeq 0.1$ mag). Todos los fotones capaces de ionizar el hidrógeno son absorbidos en una zona de transición delgada (**Transición H^+/H** , $N_{\text{H}} = 10^{19} \text{ cm}^{-2}$ o $\Delta A_v = 10^{-2}$) donde se produce la transición de hidrógeno ionizado a hidrógeno neutro. Los fotones FUV penetran más allá de la región HII, donde comienza la región de fotodisociación, y fotodisocian todas las moléculas, incluido el hidrógeno molecular. Pero los fotones incidentes tienen energías por debajo del límite Lyman ($h\nu < 13.6 \text{ eV}$) y ya no pueden ionizar el hidrógeno. En el frente de ionización el hidrógeno se encuentra principalmente en forma atómica, pero los elementos con energías de ionización menores que el hidrógeno (e.g. C, S, Fe, Si) pueden permanecer ionizados. Esta interfase está formada principalmente por hidrógeno y oxígeno atómico ($\text{PI}(\text{H y O}) = 13.6 \text{ eV}$), y carbono ionizado ($\text{PI}(\text{C}) = 11.3 \text{ eV}$), y se extiende hasta profundidades de $A_v \gtrsim 1 - 2$ mag (o $N = 2 - 4 \times 10^{21} \text{ cm}^{-2}$) desde el frente de ionización, donde el polvo logra atenuar considerablemente la radiación FUV incidente. La temperatura característica de una región de hidrógeno atómico es de $10^3 - 10^4 \text{ K}$.

■ **Frente de Disociación:** A $A_v \simeq 2$ mag se encuentra el frente de disociación, donde los fotones FUV ya no tienen energía suficiente para disociar el hidrógeno molecular. En esta capa de la PDR es donde se produce la transición de hidrógeno atómico a hidrógeno molecular (**Transición H/H_2**). Se forman especies sencillas como los iones reactivos (e.g. CH^+ , SH^+ , CO^+) y se observa la emisión por fluorescencia de los PAHs y H_2 .

■ **Transición $\text{C}^+/\text{C}/\text{CO}$:** En la región de formación del H_2 , los fotones aún tienen energía suficiente como para ionizar el carbono. La interfase de C^+/C se extiende a profundidades de $A_v \simeq 2 - 4$ mag. A medida que los fotones pierden energía, el átomo de carbono deja de ionizarse y empieza a estar en forma de carbono neutro ($A_v \simeq 4$ mag). Debido a sus bajos potenciales de ionización y a que los fotones menos energéticos pueden penetrar en la PDR sin ser atenuados por los granos de polvo, Si y S, entre otras especies, permanecen ionizados a profundidades de $A_v \simeq 3 - 5$ mag. A profundidades de $A_v > 4$ mag, comienza a formarse el CO.

■ **Nube molecular:** Zona más densa y fría donde tiene lugar la química más compleja, como la formación de moléculas orgánicas complejas sobre la superficie de los granos de polvo. Las temperaturas han disminuido drásticamente desde $\sim 10^4 \text{ K}$ en el frente de ionización donde comienza la PDR, hasta $\sim 20 \text{ K}$ en la nube molecular. La química está dominada por los rayos cósmicos por lo que es más lenta.

3.3. Observaciones y modelos teóricos

La gran variedad de condiciones de excitación que se pueden dar dentro de una PDR permite estudiarlas en distintos rangos del espectro electromagnético. Las PDRs emiten muy intensamente dentro del rango IR, debido a que la mayor parte de la radiación FUV es absorbida por los granos de polvo y reemitida en el IR en forma de continuo, o bien por moléculas grandes como PAHs, los cuales emiten en forma de bandas IR (UIBs, *Unidentified Infrared Bands*). Además, en el IR se produce emisión intensa en líneas de átomos e iones, como por ejemplo [CII] 158 μm y [OI] 63 μm , C, Si, líneas ro-vibracionales de H_2 y bandas IR de emisión de PAHs. En el rango (sub)milimétrico es posible observar las moléculas presentes a distintas profundidades en la nube (CO, CN, HCO, SO, SO_2 , CS, etc.). El intenso campo de radiación FUV favorece la formación de radicales e iones como CO^+ , SH^+ o HOC^+ , típicos de regiones irradiadas por FUV (e.g. Fuente et al. 2008, Goicoechea et al. 2017).

Las regiones de fotodisociación comienzan a estudiarse a finales de los años 70 a través de la observación de las líneas de estructura fina [OI] 63 μm y [CII] 158 μm en las regiones de formación de estrellas masivas Orion A y M17 (Melnick et al. 1979, Storey et al. 1979, Russell et al. 1980, Russell et al. 1981). Phillips & Huggins (1981) y Keene et al. (1985) observaron la línea [CI] 609 μm en columnas extensas de carbono atómico en nubes moleculares. Todos estos estudios revelaron que el hidrógeno atómico y molecular coexisten en una zona de gas neutro entre las regiones HII y las nubes moleculares densas. Tras estas observaciones, Tielens & Hollenbach (1985ab) y Sternberg & Dalgarno (1989) desarrollaron los primeros modelos de PDRs para tratar de entender la interacción entre la radiación y las nubes del medio interestelar.

Desde entonces, numerosos estudios, tanto teóricos como observacionales, han contribuido a la mejora en el conocimiento de la estructura y composición química de las

regiones de fotodisociación (e.g. Tielens & Hollenbach 1985ab, 1990, 1995; Sternberg & Dalgarno 1995; Roueff & Petit 2005; Roueff et al. 2007; Viti 2013ab; Herrmann et al. 1997; Brooks et al. 2003; Fleming et al. 2010; Fuente et al. 2005ab, 2008, 2010; Pilleri et al. 2012, 2013, 2014, 2015; Nagy et al. 2013; Cuadrado et al. 2015, 2016, 2017; Goicoechea et al. 2004, 2016, 2017).

Los modelos teóricos actuales resuelven de modo auto-consistente el transporte de radiación UV, el balance térmico y la química, fenómenos todos ellos acoplados entre sí. Pero los modelos aún no son capaces de estimar correctamente las abundancias de todas las especies debido a que algunas magnitudes y procesos todavía son desconocidos. Por ejemplo, no se conocen todas las secciones eficaces de fotodisociación de las moléculas (sobre todo de radicales), las propiedades del polvo en el UV lejano o los procesos de formación y evaporación de las moléculas complejas sobre la superficie de los granos de polvo. Además, son modelos estáticos (i.e. en equilibrio) que no calculan la dinámica de una PDR ni su evolución temporal.

En la Tabla 3.2 se enumeran los códigos de PDRs más importantes que se utilizan en la actualidad para estudiar los procesos químicos y físicos de estas regiones. Estos códigos difieren en la geometría adoptada para realizar los cálculos, en el inventario de reacciones químicas (en fase gas y la superficie de los granos de polvo), en los coeficientes colisionales o de fotodisociación empleados, o en el tratamiento del balance energético, entre otros. Por lo tanto, las predicciones de las propiedades físicas y químicas de una misma PDR obtenidas por cada uno de estos códigos pueden variar. Nosotros hemos utilizado el código Meudon (Le Petit et al. 2002, 2005, 2006, Le Boulrot et al. 1993, Goicoechea & Le Boulrot 2007) para interpretar los procesos químicos en fase gas y el balance de energía en la Barra de Orión (Capítulos 5, 7, 8 y 10).

Tabla 3.2: Lista de los códigos de PDR más importantes (Röllig et al. 2006).

Código	Referencias
Aikawa	Lee et al. (1996)
Cloudy	Ferland et al. (1998), Abel et al. (2005), Shaw et al. (2005)
COSTAR	Kamp & Bertoldi (2000), Kamp & van Zadelhoff (2001)
HTBKW	Tielens & Hollenbach (1985), Kaufman et al. (1999), Wolfire et al. (2003)
KOSMA- τ	Störzer et al. (1996), Bensch et al. (2003), Röllig et al. (2006)
Lee96mod	Lee et al. (1996)
Leiden	Black & van Dishoeck (1987), van Dishoeck & Black (1988), Jansen et al. (1995)
Meijerink	Meijerink & Spaans (2005), Esplugues et al. 2016
Meudon	Le Petit et al. (2002; 2005; 2006), Le Bourlot et al. (1993), Goicoechea & Le Bourlot (2007)
Sternberg	Sternberg & Dalgarno (1989; 1995), Boger & Sternberg (2005)
UCL_PDR	Taylor et al. (1993a,b), Papadopoulos et al. (2002), Bell et al. (2005)

3.4. Procesos físicos en PDRs

Todos los procesos físicos que tienen lugar en una PDR están impulsados por la presencia de intensos campos FUV, que controlan la estructura en capas, la composición química y el balance energético del gas (Tielens & Hollenbach 1985ab). Los fotones FUV penetran en la nube molecular ionizando, disociando y calentando el gas. Los mismos procesos físicos que se aplican en PDRs asociadas con las superficies de nubes moleculares (Abel et al. 2005, Le Petit et al. 2006, Kaufman et al. 2006) también son aplicables a las nubes difusas (Wolfire et al. 2003, Shaw et al. 2006) pero con campos FUV más débiles ($G_0 = 1 - 10$) y densidades de columna más bajas ($N = 10^{19} - 10^{21} \text{ cm}^{-2}$, Wolfire 2010). Los procesos físicos más importantes que tienen lugar en una PDR se describen a continuación.

3.4.1. Radiación FUV incidente

3.4.1.1. Fuentes de opacidad dentro de una PDR

La profundidad a la que los fotones FUV pueden penetrar en la nube depende de:

■ **El flujo de radiación FUV incidente.** El flujo de radiación FUV incidente se mide en unidades del campo de Habing o del campo de Draine. El campo de Habing se corres-

ponde con un flujo unidireccional FUV interestelar promedio $G_0 = 1.6 \times 10^{-3} \text{ erg cm}^{-2} \text{ s}^{-1} = 10^8 \text{ fotones cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$ (Habing 1968, Hollenbach & Tielens 1997). Esto es equivalente a un campo de radiación de $\chi = 1.7$ usando unidades del campo de Draine (Draine 1978). El flujo de radiación FUV incidente, G_0 , puede ser producido por el campo de radiación interestelar (ISRF) o por estrellas OB cercanas, por eso, en una PDR el flujo de radiación FUV incidente varía típicamente desde $\chi = 1.7$ hasta 10^6 en el gas más próximo a la fuente de emisión ($< 0.1 \text{ pc}$ de una estrella tipo O; Hollenbach & Tielens 1997).

■ **La densidad de la nube, n .** La transferencia de radiación a través de la PDR también depende de la distribución del gas y del polvo, ya que los fotones pueden alcanzar zonas mucho más profundas de la PDR en regiones con grumos (i.e. zonas de mayor densidad) que en regiones homogéneas. Las densidades típicas de las PDRs varían entre $n \simeq 10^2 - 10^7 \text{ cm}^{-3}$, desde las nubes difusas hasta las PDRs más densas asociadas a las nubes moleculares.

■ **Extinción debida al polvo.** Los granos de polvo interactúan de forma muy eficaz con la radiación FUV a través de procesos de absorción o dispersión (*scattering*). Por lo tanto, la extinción FUV que proporciona el polvo (y gran-

des moléculas como PAHs) hace que las regiones internas de las nubes estén en mayor o menor grado protegidas de la radiación UV interestelar. Los granos de polvo absorben y dispersan la radiación UV y la reemiten como emisión en el continuo, en el rango del IR. El espectro resultante es muy parecido al de un cuerpo negro caracterizado por una temperatura T_d (temperatura del polvo), modificado por el efecto de un coeficiente de absorción que depende de la frecuencia. Los parámetros de absorción y dispersión de los granos determinan la profundidad a la que penetran los fotones FUV dentro de la PDR.

■ Las moléculas más abundantes como H_2 y CO también proporcionan una fuente de opacidad muy importante a las longitudes de onda efectivas para la fotodisociación (Goicoechea & Le Bourlot 2007). Estas moléculas reemiten en el rango IR parte de la radiación FUV absorbida en un proceso de fluorescencia (ver Sección 1.4.2.3).

■ **Efecto de auto-apantallamiento.** El efecto de auto-apantallamiento de las moléculas de H_2 (e.g. Field et al. 1966, Draine & Bertoldi 1996, Hollenbach & Tielens 1997, 1999) y CO (e.g. Glassgold et al. 1985, Eidelberg et al. 1992, van Dishoeck & Black 1988, Lee et al. 1996) forma un “escudo” que protege a la nube de la radiación FUV (Van Dishoeck 2011). Las moléculas presentes en las regiones más externas de la PDR absorben los fotones FUV efectivos para la fotodisociación, de modo que ya no pueden penetrar hasta las regiones más profundas de la nube. El efecto es más acusado para el H_2 debido a su mayor abundancia con respecto al CO. La fotodisociación del H_2 se produce por la absorción en las bandas de Lyman y Werner a $912 - 1100 \text{ \AA}$ seguida por la emisión espontánea al continuo vibracional del estado fundamental (Sección 1.4.2.3). Las líneas más intensas de H_2 se vuelven ópticamente espesas a densidades de columna de $10^{14} - 10^{15} \text{ cm}^{-2}$, lo que implica que las moléculas que se encuentran a más profundidad dentro de la nube están protegidas de la radiación disociadora porque todos los fotones de energías relevantes han sido absorbidos en el borde de la nube (auto-apantallamiento).

Las bandas de absorción saturadas de H y H_2 en el mismo intervalo de longitudes de onda también eliminan una fracción considerable de la radiación ionizante.

El carbono atómico también produce un efecto de auto-apantallamiento dentro de la nube. La fotoionización del carbono atómico tiene una sección transversal continua de $\sim 10^{-17} \text{ cm}^2$ entre las longitudes de onda $912 - 1100 \text{ \AA}$. Por lo tanto, a densidades de columna $N(C) > 10^{17} \text{ cm}^{-2}$, el carbono comienza a auto-apantallarse (Werner et al. 1970).

3.4.1.2. Parámetro G_0/n

La densidad de la nube molecular, n , y el flujo de radiación FUV incidente, G_0 , son los principales factores que determinan la estructura en capas de una PDR. El cociente G_0/n es una medida de la relación entre la tasa de fotodisociación y la tasa de formación de moléculas. La importancia del auto-apantallamiento de las moléculas de H_2 y CO frente a la opacidad del polvo en una PDR depende de este valor, y determina hasta qué punto los fotones FUV penetran en la PDR, y por lo tanto, la profundidad a la que se producen las transiciones H/H_2 y $C^+/C/CO$. En aquellas PDRs donde el cociente G_0/n es bajo, la fotodisociación tiene lugar en las capas más externas, mientras que en aquellas con valores elevados de G_0/n , las moléculas son fotodisociadas más hacia el interior de la nube (Hollenbach et al. 1990).

Cuando $G_0/n \lesssim 0.01 \text{ cm}^3$ (e.g. las nubes difusas expuestas a la ISRF) el auto-apantallamiento del H_2 domina sobre los granos de polvo y hace que las transiciones H_1/H_2 y C^+/CO se produzcan a una profundidad de $A_v \leq 1 \text{ mag}$.

Cuando $G_0/n \gtrsim 0.01 \text{ cm}^3$ (PDRs asociadas con fuentes de FUV brillantes), los granos de polvo son la fuente de opacidad más importante y determinan la localización de la transición H_1/H_2 . A $A_v \gtrsim 1 - 2 \text{ mag}$, el polvo ya ha reducido la tasa de fotodisociación de H_2 lo suficiente como para que se acumule la densidad de columna de H_2 necesaria para producir el efecto de auto-apantallamiento.

El auto-apantallamiento de CO solo es importante cuando G_0/n toma valores muy bajos. Debido a que la abundancia de CO con respecto a H_2 es de $\sim 10^{-4}$, la transición $C^+/C/CO$ es mucho menos pronunciada que la transición H_1/H_2 .

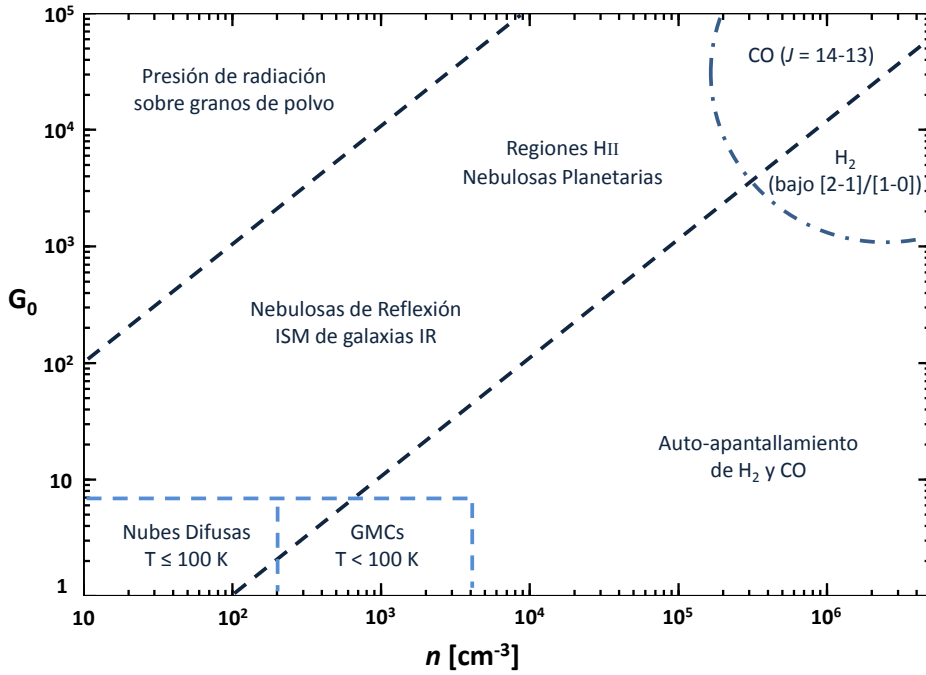


Figura 3.2: Representación del flujo de radiación FUV incidente, G_0 en función de la densidad de la nube, n . En la gráfica se nombran también las PDRs de gas neutro asociados con diversos fenómenos astrofísicos. Créditos: Gráfica original de Hollenbach et al. (1990).

En la Fig. 3.2 se representa G_0 en función de n . La gráfica se divide en tres regiones separadas por líneas punteadas. En la parte superior izquierda, se representan las regiones con $G_0/n \geq 10 \text{ cm}^3$, donde la presión de radiación sobre los granos de polvo los conduce supersónicamente a través del gas. Este espacio de parámetros no es accesible a los modelos típicos de PDRs, los cuales no tienen en cuenta los efectos dinámicos. En la región central se incluyen aquellas PDRs donde la atenuación del FUV por los granos de polvo domina sobre el auto-apantallamiento. En la parte inferior derecha, con $G_0/n \leq 0.01 \text{ cm}^3$, es donde el auto-apantallamiento del H_2 lleva a las transiciones $\text{H I}/\text{H}_2$ y C^+/CO a $A_v > 1 \text{ mag}$. La región superior derecha, de alta densidad y alto G_0 (curva punteada) es el rango en el que el fuerte calentamiento, el auto-apantallamiento del H_2 y la desexcitación colisional de H_2 se combinan para producir una emisión intensa de transiciones de CO relativamente energéticas (por ejemplo, $J = 14 \rightarrow 13$) y bajas proporciones de $\text{H}_2 [v = 2 \rightarrow 1 \text{ S}(1)]/[v = 1 \rightarrow 0 \text{ S}(1)]$ (Hollenbach 1990).

3.4.2. Equilibrio térmico

En estado estacionario, la temperatura cinética en cada posición de la nube se determina igualando los procesos de calentamiento y enfriamiento del gas. El calentamiento del gas implica la transferencia de energía desde los fotones FUV y los rayos cósmicos que inciden en la materia hasta convertirse en energía cinética del gas. El enfriamiento, implica la conversión de energía cinética en fotones emitidos por átomos y moléculas que pueden escapar de la nube. En el Capítulo 1 se explican en detalle todos los procesos de calentamiento y enfriamiento del gas en el medio interestelar. En esta Sección se resumen los principales procesos de intercambio de energía que se producen en las PDRs. Estos procesos dependen del campo de radiación FUV incidente y de la densidad de la nube. En la Fig. 3.3 se muestra la contribución de diferentes procesos físicos al balance energético de una PDR de alta iluminación como la Barra de Orión en función de la profundidad de la nube. Los modelos representados en la Fig. 3.3 se han realizado con el código Meudon (ver Sección 4.3) en condiciones isobáricas con una presión térmica de $P_{\text{th}}/k = nT = 1 \times 10^8 \text{ K cm}^{-3}$ y un campo de radiación FUV de $\chi = 2 \times 10^4$ en unidades de Draine.

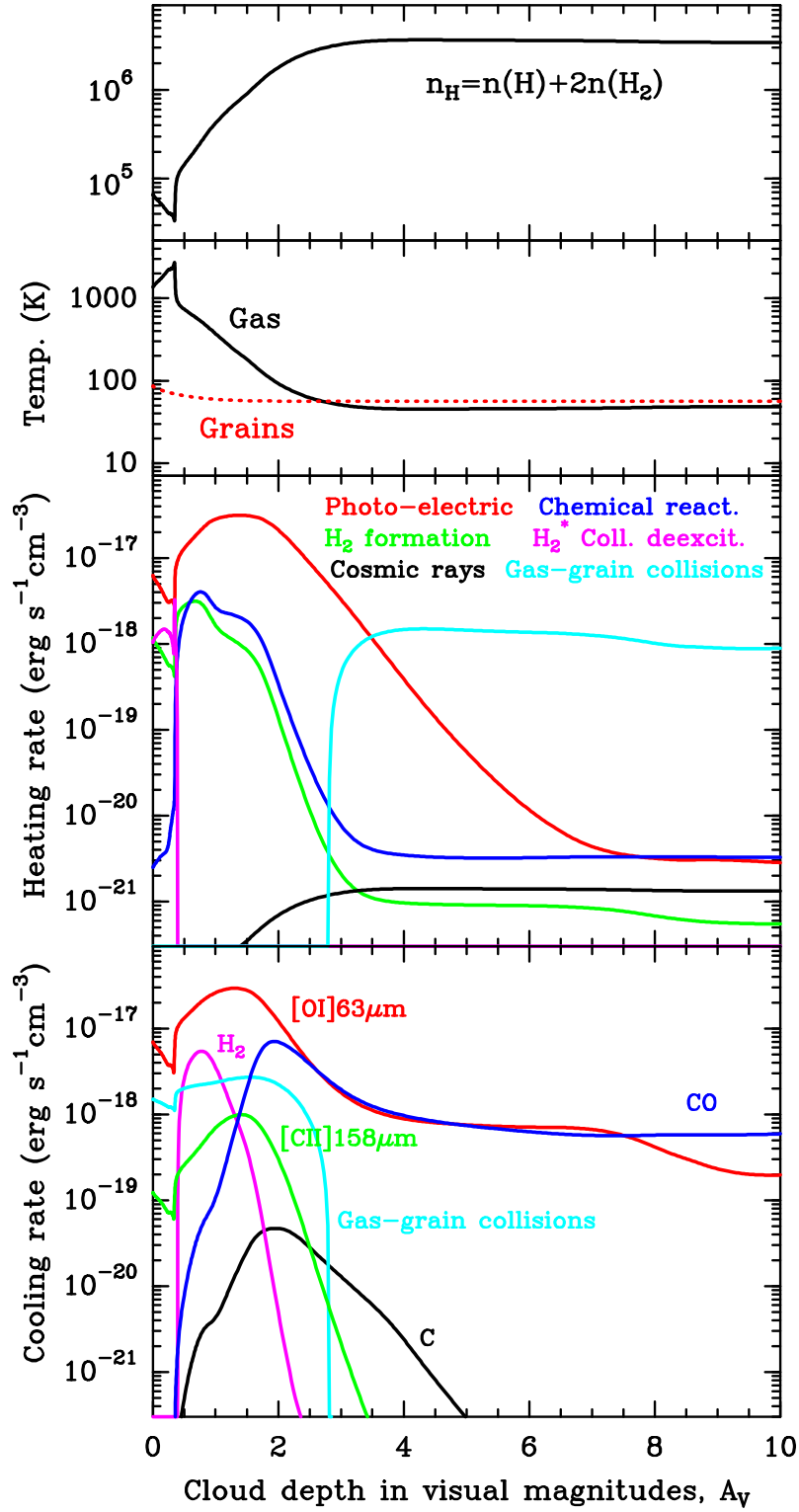


Figura 3.3: Modelos isobáricos ($P_{th}/k = nT = 1 \times 10^8$ K cm $^{-3}$) de PDR en fase gas que muestran los gradientes de densidad y temperatura (dos paneles superiores) en función de la profundidad de la nube para una PDR con un campo de radiación FUV incidente de $\chi = 2 \times 10^4$ en unidades de Draine. El flujo de fotones FUV incide desde la izquierda. Los paneles inferiores muestran la contribución de los diferentes procesos de calentamiento (tercer panel) y enfriamiento (panel inferior) al balance energético.

El proceso de **calentamiento del gas** dominante en una PDR densa y altamente irradiada (como la Barra de Orión) es la inyección fotoeléctrica de electrones de alta energía de la superficie de pequeños granos de polvo y PAHs. En la superficie de la PDR ($A_V < 0.5$ mag) también es importante el calentamiento por desexcitación colisional del H_2 vibracionalmente excitado (anteriormente excitado radiativamente por absorción de fotones UV). Este mecanismo de calentamiento sólo se produce en PDRs densas. La formación de H_2 sobre los granos de polvo seguido de desexcitación colisional contribuye al calentamiento del gas a $A_V \lesssim 3$ mag. La formación a través del mecanismo de Eley–Rideal seguido de desexcitación colisional puede ser una de las fuentes de calentamiento más importante en los bordes de las PDRs, donde el auto-apantallamiento del H_2 aún no es eficiente (Le Boulrot 1995, 2012). La energía liberada en reacciones químicas exotérmicas es importante a profundidades menores que $A_V < 4$ mag. Además, a $A_V \gtrsim 3$ mag, la temperatura del polvo es ligeramente superior a la del gas y, si la densidad es grande, las colisiones entre las partículas de gas y los granos de polvo pueden transferir energía al gas

y calentarlo. Otros mecanismos que contribuyen al calentamiento del gas son la fotoionización del carbono (en las PDRs, los átomos de hidrógeno ya no pueden ser ionizados y la principal fuente de fotoelectrones es el carbono) y la fotodisociación del H_2 . En las zonas más profundas de la PDR, donde ya no hay fotones FUV, adquiere importancia la ionización por rayos cósmicos.

El proceso principal de **enfriamiento del gas** se debe a la excitación de átomos e iones abundantes a estados electrónicos de baja energía (emisión de líneas de estructura fina de átomos e iones abundantes, principalmente [OI] 63 μm , [CII] 158 μm y [SII] 35 μm , etc.). La emisión radiativa de H_2 previamente excitado por colisiones enfría el gas a $A_V \simeq 0.5 - 2$ mag. En la superficie de la PDR el polvo está mucho más frío que el gas, así que las colisiones gas-polvo enfrían el gas hasta $A_V \simeq 3$ mag. Las transiciones rotacionales de moléculas (principalmente CO) dominan el enfriamiento a altas profundidades, cuando el flujo de radiación incidente ya ha disminuido y el oxígeno y el carbono ya no están en forma atómica.

3.5. Procesos químicos en las PDRs

Los procesos químicos simples que se producen en las PDRs se han discutido en detalle en Tielens & Hollenbach (1985ab), Hollenbach et al. (1991), Le Boulrot et al. (1993), Fuente et al. (1993, 1995), Jansen et al. (1995a, 1995b), Sternberg & Dalgarno (1995), Bergin et al. (1997), Turner (1996ab). La química en regiones de fotodisociación también está fuertemente condicionada por la radiación FUV incidente, así como por las altas temperaturas alcanzadas en la superficie de la PDR. La formación y fotodisociación de hidrógeno molecular son procesos clave en una PDR. La química comienza una vez que el hidrógeno molecular se ha formado en la superficie del grano y se evapora a la fase gas. El elevado flujo de fotones FUV fotodisocia y fotoioniza las moléculas y los átomos en las regiones más expuestas a la radiación. Las reacciones de recombinación radiativa y las reacciones de transferencia de carga influyen en el balance de ionización del gas.

Cuando el hidrógeno molecular absorbe un fotón UV y

se desexcita radiativamente, generalmente queda en un estado vibracionalmente excitado. Esta especie, H_2^* , juega un papel decisivo en la química de PDRs. La presencia tanto de gas caliente ($T_k \gtrsim 500$ K) así como de H_2^* vibracionalmente excitado ($v = 1 \rightarrow 0$ S(1); se puede observar en el IR cercano a ~ 2.1 μm) desencadena una química característica de PDRs en la que pueden producirse reacciones altamente endotérmicas y reacciones con grandes barreras de activación (e.g. Agúndez et al. 2010, Cuadrado et al. 2015). Algunos ejemplos de estos procesos químicos son las reacciones de H_2 con C^+ , O y S^+ (especies muy abundantes en las superficies iluminadas de las PDRs) que permiten la formación de CH^+ , OH y SH^+ , y representan los primeros pasos de la química de PDRs. Habart et al. (2010), Goicoechea et al. (2011), Nagy et al. (2013) y Müller et al. (2014) presentan detecciones de estas especies en PDRs.

En la actualidad sabemos que los procesos químicos que se producen en el medio interestelar que conducen a

Tabla 3.3: Principales reacciones químicas en fase gas en PDRs.

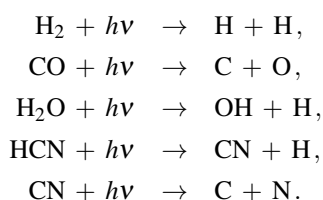
Nombre de la Reacción	Reacción Química	Ejemplo
Fotodisociación	$AB + h\nu \rightarrow A + B$	$H_2O + h\nu \rightarrow OH + H$
Fotoionización	$A + h\nu \rightarrow A^+ + e^-$	$C + h\nu \rightarrow C^+ + e^-$
Ionización disociativa por rayos cósmicos	$AB + r.c. \rightarrow A^+ + B + e^-$	$H_2 + r.c. \rightarrow H^+ + H + e^-$
Ionización por rayos cósmicos	$A + r.c. \rightarrow A^+ + e^-$	$H_2 + r.c. \rightarrow H_2^+ + e^-$
Asociación radiativa	$A + B \rightarrow AB + h\nu$	$SO + O \rightarrow SO_2 + h\nu$
Neutro-Neutro	$A + B \rightarrow C + D$	$O + H_2 \rightarrow OH + H$
Ion-Molécula	$A^+ + B \rightarrow C^+ + D$	$S^+ + H_2 \rightarrow SH^+ + H$
Transferencia de carga	$A^+ + B \rightarrow A + B^+$	$CO^+ + H \rightarrow CO + H^+$
Recombinación radiativa	$A^+ + e^- \rightarrow A + h\nu$	$H^+ + e^- \rightarrow H + h\nu$
Recombinación disociativa	$AB^+ + e^- \rightarrow A + B$	$HCO^+ + e^- \rightarrow CO + H$

la formación y destrucción de moléculas, se engloban en dos grandes grupos: **i)** reacciones en fase gas, y **ii)** reacciones en la superficie de los granos. Ambos procesos están en constante interacción.

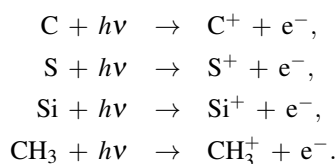
3.5.1. Química de PDRs en fase gas

A medida que aumenta la extinción visual de una PDR, el flujo de radiación FUV se atenúa. En consecuencia, las reacciones químicas que se producen en cada punto de la nube pueden variar, así como la abundancia de las distintas especies (átomos, moléculas, iones y electrones), dando lugar a las principales transiciones químicas de las PDRs: $H^+/H/H_2$ y $C^+/C/CO$ (Sección 3.2). La Tabla 3.3 resume las principales reacciones en fase gas que se pueden producir en una PDR. Debido a las bajas densidades del medio interestelar, las reacciones a tres cuerpos son muy poco probables y la química en fase gas está determinada principalmente por reacciones a dos cuerpos.

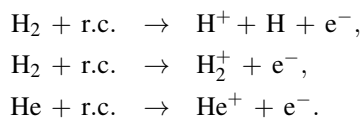
En una PDR, las moléculas se destruyen por medio de **reacciones de fotodisociación**. Los fotones FUV fragmentan las moléculas en especies más pequeñas:



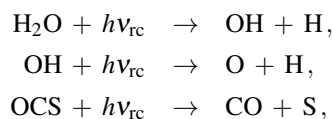
Los fotones FUV también producen **reacciones de fotoionización**, por eso en las PDRs hay una abundancia muy elevada de C^+ , S^+ , Si^+ , etc. y cationes moleculares. Son ejemplos de reacciones de fotoionización:



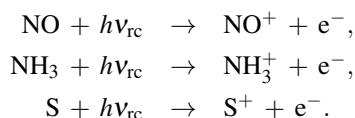
En las zonas más profundas de la PDR donde ya no hay fotones FUV, los **rayos cósmicos** son los responsables de la disociación e ionización de las especies:



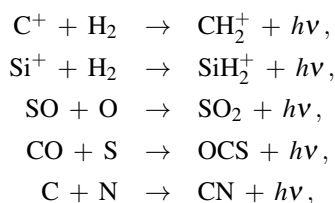
Los rayos cósmicos también pueden excitar el hidrógeno molecular, que al desexcitarse radiativamente emite fotones FUV (fotones secundarios, con $G_0^r \simeq 10^{-4}$; Prasad & Tarafdar 1983) que pueden a su vez fotodisociar otras especies:



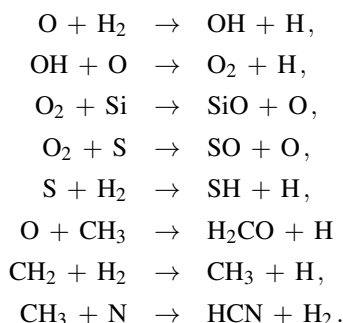
y fotoionizarlas:



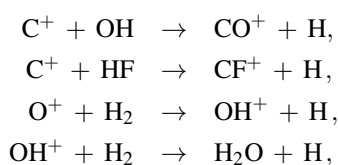
En las **reacciones de asociación radiativa** se produce la colisión entre dos especies (A y B) dando lugar a un complejo activado AB^* en un estado excitado que se estabiliza emitiendo un fotón para eliminar el exceso de energía. También podría colisionar con un tercer cuerpo y desexcitarse colisionalmente, pero las reacciones a tres cuerpos son muy poco probables. Ejemplos de reacciones por asociación radiativa:



Las **reacciones neutro-neutro** pueden presentar barreras de activación debido a la rotura de enlaces producidos en el reajuste molecular. Por lo tanto, estas reacciones sólo son importantes cuando la temperatura del gas es elevada (PDRs, *hot cores* asociados a la formación estelar, choques, etc.). Algunas reacciones neutro-neutro con átomos o radicales, como C y OH, no tienen energía de activación y sí son importantes en nubes frías. Ejemplos de reacciones neutro-neutro:

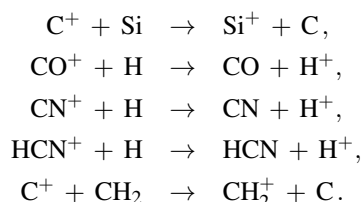


Las **reacciones ion-molécula** son muy importantes en las PDRs debido a la elevada abundancia de iones. Este tipo de reacciones son más rápidas que las reacciones neutro-neutro ya que los iones son mucho más reactivos que las especies neutras. El ion induce en la molécula reactante un momento dipolar inducido creando una interacción dipolo – dipolo inducido que aumenta la sección transversal de la reacción y ayuda a superar la barrera de activación. Algunos ejemplos de reacciones ion-molécula son:

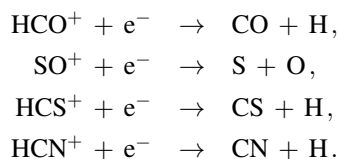


Entre las reacciones ion-molécula destacan especialmente las reacciones de inserción de carbono ya que son muy importantes en la producción de hidrocarburos (ver Herbst & Leung 1989): $CH_n + C^+ \rightarrow C_2H_{n+1}^+ + H$. Los productos obtenidos en estas reacciones pueden reaccionar posteriormente con H_2 para producir especies más saturadas ($C_nH_m^+ + H_2 \rightarrow C_nH_{m+1}^+ + H$), aunque estas reacciones de hidrogenación pueden tener energías de activación elevadas.

La **reacción de transferencia de carga** entre H^+ y O ($H^+ + O \rightarrow H + O^+$) activa las rutas químicas que incorporan el ion O^+ a la química de PDRs. La transferencia de carga de C^+ a S ($C^+ + S \rightarrow C + S^+$) es una fuente importante de C neutro en la transición $C^+/C/CO$. Otros ejemplos de reacciones de transferencia de carga son:



En las **reacciones de recombinación radiativa**, una especie iónica se recombina con un electrón para generar una especie neutra y la emisión de un fotón (e.g. $H^+ + e^- \rightarrow H + h\nu$). En las **reacciones de recombinación disociativa**, un ion molecular (AB^+) se recombina con un electrón y forma una especie neutra en un estado electrónico excitado (AB^*) que puede disociarse en especies más simples ($AB^+ + e^- \rightarrow A + B$), por ejemplo:



Todas estas reacciones tienen lugar en distintas zonas de la PDR ya que dependen de las características físicas de la nube (flujo de radiación FUV, temperatura y densidad) y de las abundancias químicas de las especies reactantes. Los procesos de formación de los iones reactivos son un claro ejemplo. La formación de iones reactivos como CH^+ y SH^+ dependen de la disponibilidad de C^+ , S^+ y H_2^* . La reacción $C^+ + H_2(v) \rightarrow CH^+ + H$, por ejemplo, es endotérmica por $\Delta E/k \simeq 4300$ K cuando el H_2 está en estado fundamental ($v = 0$), pero exotérmica y rápida para estados vibracional-

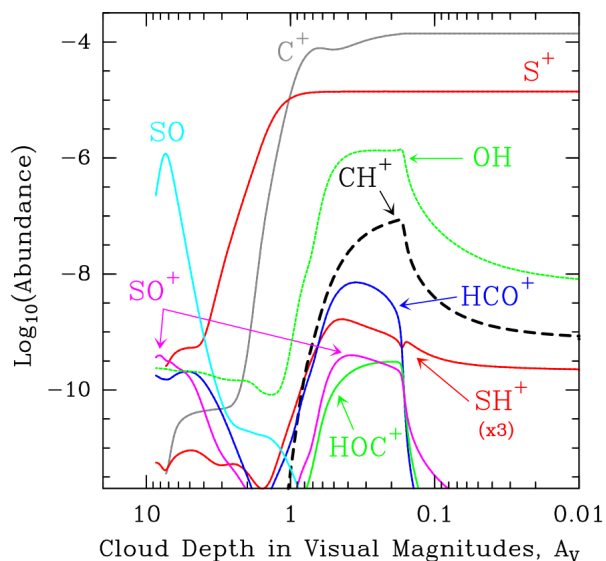


Figura 3.4: Perfiles de abundancia de iones reactivos obtenidos con un modelo isobárico de una PDR con $P_{\text{th}}/k = 2 \times 10^8 \text{ K cm}^{-3}$ y $\chi = 10^4$. El campo de radiación FUV incide por el lado derecho de la figura y disminuye con la profundidad óptica de la nube (Goicoechea et al. 2017).

mente excitados ($v \geq 1$; e.g. Hierl et al. 1997; Agúndez et al. 2010). Otros iones reactivos como CO^+ y HOC^+ se forman en reacciones a altas temperaturas de C^+ con OH y H_2O , respectivamente, y SO^+ por reacción de S^+ con OH, por lo que también son abundantes en las superficies iluminadas de las PDRs. (e.g. Goicoechea et al. 2011, 2017; Nagy et al. 2013, 2017; Parikka et al. 2017). A medida que el campo de radiación FUV se atenúa hacia el interior de la nube, la abundancia de las especies parentales de los iones reactivos disminuye y por lo tanto su abundancia decrece rápidamente a partir de $A_V > 1$. En la Fig. 3.4 se presenta un modelo de la formación y destrucción de iones reactivos en PDRs que muestra la estratificación química de estas especies (Goicoechea et al. 2017).

Sternberg & Dalgarno (1995) han llevado a cabo un estudio exhaustivo de los procesos químicos simples en fase gas en cada zona de una PDR. En la Fig. 3.5 se muestran cuatro esquemas de las reacciones más importantes en la química de los compuestos de carbono, oxígeno, azufre y nitrógeno. Hasta ahora se había considerado que las PDRs solo podían dar lugar a una química relativamente sencilla para formar moléculas simples. Pero recientemente se ha descubierto que la química en estas regiones es mucho más rica y compleja (e.g. Cuadrado et al. 2015, 2016, 2017).

3.5.2. Química en la superficie de los granos de polvo

La química en los mantos helados de los granos de polvo desempeña un papel fundamental en la formación y destrucción de moléculas en el medio interestelar. Las especies presentes en la fase gas pueden ser adsorbidas en la superficie de los granos de polvo, difundir a través del grano, reaccionar con otros átomos y moléculas para formar especies más complejas y ser posteriormente devueltas a la fase gas por mecanismos de desorción.

Existen dos tipos de interacciones entre los átomos y la superficie del grano de polvo: (i) Procesos de fisisorción (adsorción física): las especies son adsorbidas en la superficie de los granos por fuerzas débiles del tipo Van der Waals, con energías de enlace de $\sim 0.01 - 0.2 \text{ eV}$. Este tipo de enlace permite que los átomos más ligeros difundan fácilmente por la superficie y reaccionen con otras especies, superando las barreras de energía a través de saltos térmicos o por efecto tunel (dependiendo de la temperatura del grano). (ii) Procesos de quimisorción (adsorción química): la unión se produce a través de enlaces químicos fuertes, con energías de enlace del orden de $\sim 1 \text{ eV}$. Los átomos o moléculas quimisorbidos tienen mucha menos movilidad que los fisisorbidos por lo que los procesos químicos involucrados son menos eficientes (Tielens & Allamandola 1987, Herbst 2000).

La química de superficie es mucho más compleja que las reacciones que se producen en fase gas (ver Sección 3.5.1). Las moléculas en la superficie de los granos se forman principalmente a través de dos mecanismos: (i) Mecanismo de Langmuir-Hinshelwood: los átomos fisisorbidos difunden por la superficie hasta reaccionar con otra especie adsorbida para formar una nueva molécula. La tasa de formación de este mecanismo depende de la temperatura del polvo. El átomo de hidrógeno domina este mecanismo de formación, ya que es el átomo más ligero (y por lo tanto más móvil), y reacciona con el oxígeno para formar H_2O (el principal componente de los hielos), con el carbono para formar CH_4 , con el CO para formar H_2CO , etc., a través de sucesivas reacciones de hidrogenación. (ii) Mecanismo de Eley-Rideal: una especie en fase gas reacciona con una especie ya adsorbida en un grano de polvo formando una nueva molécula. La tasa de formación de este mecanismo depende de la temperatura del gas.

La síntesis de numerosas moléculas saturadas observadas en distintas regiones del medio interestelar ocurre principalmente a través de este tipo de reacciones. La reacción en fase sólida más estudiada debido a sus implicaciones astrofísicas es la formación de H_2 mediante la recombinación de dos átomos de H en la superficie de los granos de polvo (e.g. Hollenbach et al. 1971, Jura 1975, Pirronello et al. 1997, Katz et al. 1999, Cazaux & Tielens 2002, Biham & Lipshat 2002, Gry et al. 2002, Le Petit

et al. 2009, Le Bourlot et al. 2012). Los modelos actuales para esta reacción incluyen los mecanismos de formación Langmuir-Hinshelwood y Eley-Rideal. A bajas temperaturas (< 100 K) el mecanismo de Langmuir-Hinshelwood domina la formación del H_2 , mientras que a mayor temperatura domina el mecanismo de Eley-Rideal, el cual resulta eficiente hasta temperaturas de ~ 500 K (Cazaux & Tielens 2004).

Las moléculas presentes en los mantos helados de los granos de polvo pueden ser liberadas a la fase gas mediante procesos térmicos o no térmicos (e.g. Léger et al. 1985, Willacy & Millar 1998, Takahashi & Williams 2000, Bottinelli et al. 2004, Bisschop et al. 2007, Herbst & van Dishoeck 2009, Cernicharo et al. 2012, Bacmann et al. 2012). La desorción térmica domina en regiones donde el polvo alcanza altas temperaturas, como por ejemplo en *hot cores* y *hot corinos*. Los procesos no térmicos de desorción incluyen la fotodesorción (mediante fotones UV), la desorción química (la energía liberada en una reacción exotérmica puede ser suficiente para desorber a la fase gas a la molécula recién formada), la acción de rayos cósmicos o fotones secundarios (proceso dominante en el interior de los núcleos fríos protegidos de la radiación), los choques, etc. (ver Capítulo 8). Debido a la fuerza del enlace, las especies fisisorbidas pasan más fácilmente a la fase gas que las quimisorbidas.

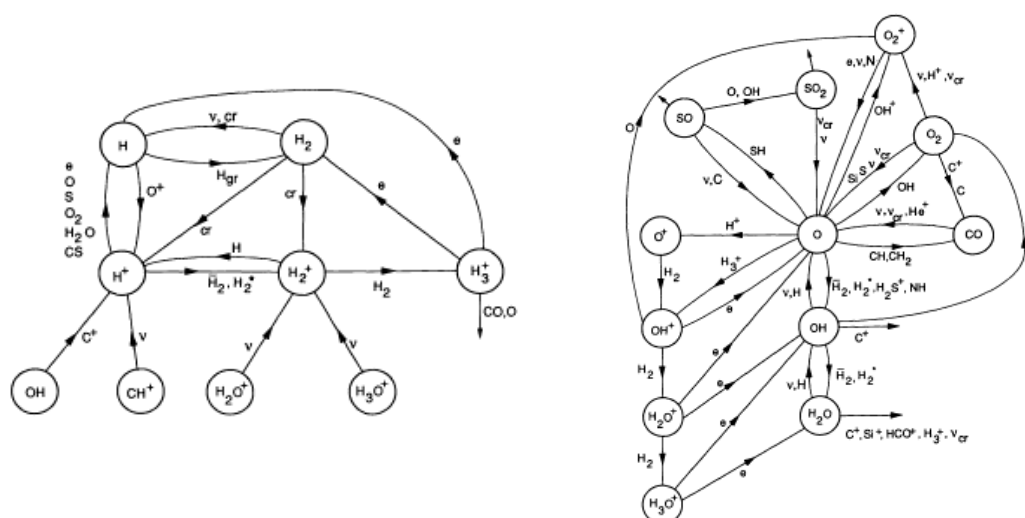


Figura 3.5: Esquemas de las reacciones más importantes de la química de hidrógeno, oxígeno, carbono, nitrógeno, azufre y silicio en una PDR (Sternberg & Dalgarno 1995).



Capítulo 4

Herramientas para el análisis de datos

4.1. Diagramas de Rotación

Los diagramas de rotación (también conocidos como diagramas de población o de Boltzmann) son una de las técnicas más empleadas para caracterizar la emisión molecular y obtener una estimación de la densidad de columna y de la temperatura rotacional de las moléculas. Observando varias transiciones de una misma especie se puede construir un diagrama en el que se representa la densidad de columna normalizada con el peso estadístico de cada nivel de rotación en función de sus energías. En condiciones de LTE los puntos representados describen una recta de cuyo ajuste se puede obtener la temperatura de rotación y la densidad de columna de las especies estudiadas. Una descripción detallada del método se puede encontrar en Goldsmith & Langer (1999).

Esta técnica se basa en el supuesto de que todas las líneas en emisión son ópticamente delgadas ($\tau_{ul} < 1$). Asumiendo esta condición, la densidad de columna de la transición $u \rightarrow l$ de una molécula se puede definir en función de la intensidad integrada de la línea observada:

$$N_u^{\tau_{ul} < 1} [cm^{-2}] = \frac{8\pi k v_{ul}^2}{hc^3 A_{ul}} \cdot \int T_{MB} dv, \quad (4.1)$$

donde A_{ul} es el coeficiente de Einstein de emisión espontánea y expresa la probabilidad de que se produzca una transición entre los niveles u y l :

$$A_{ul} [s^{-1}] = \frac{64\pi^4 v_{ul}^3 \mu^2 S_{ul}}{3hc^3 g_u}, \quad (4.2)$$

siendo S_{ul} la fuerza de línea, μ el momento dipolar eléctrico de la molécula, g_u la degeneración del nivel o peso estadístico, τ_{ul} la profundidad óptica de la transición $u \rightarrow l$, $\int T_{MB} dv$ la intensidad integrada en velocidad de la línea observada (en $K km s^{-1}$) y ν la frecuencia de la transición en Hz.

Para calcular la densidad de columna total de cada especie, se realiza el sumatorio para todos los niveles rotacionales $N = \sum_i N_i$. Suponiendo LTE, los niveles se pueblan siguiendo la ley de Boltzmann y la distribución de poblaciones de todos los niveles se pueden representar por una única temperatura (la temperatura de rotación):

$$\frac{N_u}{N_l} = \frac{g_u}{g_l} \cdot e^{-\frac{E_u - E_l}{kT_{rot}}} \quad (4.3)$$

de modo que la razón de poblaciones entre un nivel u y un nivel l viene dada por:

$$\frac{N_u}{g_u} = \frac{N}{Q(T_{rot})} \cdot e^{-\frac{E_u}{kT_{rot}}} \quad (4.4)$$

siendo N la densidad de columna total de la especie molecular en cm^{-2} , E_u/k la energía del nivel superior de la transición en K y $Q_{T_{rot}}$ la función de partición dada por:

$$Q = \sum g_u \cdot e^{-\frac{E_u}{kT_{\text{rot}}}}, \quad (4.5)$$

Tomando logaritmos neperianos en la Ecuación 4.4 y sabiendo que N_u se puede calcular con la Ecuación 4.1, se obtiene la siguiente expresión:

$$\ln \frac{N_u}{g_u} = \ln \frac{N}{Q_{T_{\text{rot}}}} - \frac{E_u}{kT_{\text{rot}}}, \quad (4.6)$$

que constituye la ecuación básica para el análisis de los diagramas de rotación.

Representando la densidad de columna normalizada con el peso estadístico de cada transición en escala logarítmica ($\ln N_u/g_u$) frente a la energía del nivel superior de cada transición E_u/k , la distribución de las poblaciones se puede

ajustar a una línea recta de cuya pendiente se obtiene la temperatura de rotación y a partir de la ordenada en el origen se obtiene la densidad de columna total N de la especie:

$$\ln \left(\frac{8\pi k v_{ul}^2}{hc^3 A_{ul} g_u} \cdot \eta_{bf}^{-1} \cdot \int T_{MB} dv \right) = \ln \frac{N}{Q_{T_{\text{rot}}}} - \frac{E_u}{kT_{\text{rot}}}, \quad (4.7)$$

La función de partición $Q(T_{\text{rot}})$ necesaria para la obtención de la densidad de columna se ha calculado a partir de la temperatura de rotación derivada del diagrama de rotación (Ecuación 4.5).

Una de las grandes ventajas de los barridos espectrales (ver Sección 5.2.1) es la gran cantidad de transiciones encontradas para cada especie molecular, lo que permite un mejor ajuste de su diagrama rotacional y por lo tanto una mejor estimación de sus parámetros físicos.

4.2. Código de transferencia radiativa MADEX

MADEX es un catálogo de espectroscopía molecular y un código de transferencia radiativa y excitación molecular desarrollado por el Prof. J. Cernicharo (Cernicharo et al. 2012). MADEX contiene información espectroscópica actualizada (constantes rotacionales, frecuencias, energías, coeficientes de Einstein, fuerzas de línea...) para ~1300 familias de moléculas, con más de 5600 entradas espectroscópicas que incluyen isotópicos y estados vibracionalmente excitados. Incluye también todos los coeficientes de colisión calculados hasta la fecha, necesarios para resolver las ecuaciones de equilibrio estadístico y poder estimar las intensidades emergentes de las líneas rotacionales en las nubes moleculares.

El código MADEX permite estudiar las condiciones de excitación de una fuente astronómica y reproducir el espectro emergente utilizando las condiciones físicas y parámetros de la nube molecular o envoltura circunestelar. Para ello utiliza la aproximación LTE o LVG (en moléculas con co-

eficientes colisionales conocidos) en un medio homogéneo isotérmico 1D y asumiendo una geometría esférica.

En la aproximación LVG (el formalismo del LVG se describe en Goldreich & Kwan 1974), las ecuaciones de equilibrio estadístico se resuelven asumiendo condiciones de excitación locales y un formalismo de probabilidad de escape promediado geométricamente para los fotones emitidos (Sobolev 1960, Castor 1970). Esta descripción permite tener en cuenta el transporte radiativo y la excitación y desexcitación colisional de una forma sencilla y computacionalmente más rápida que los códigos no locales más sofisticados en los que el acoplamiento radiativo entre las diferentes posiciones de la nube se tratan explícitamente (simulaciones Montecarlo, métodos ALI, etc.). En el Capítulo 7 (Cuadrado et al. 2015) se realiza un estudio comparativo del código MADEX y el código RADEx¹, un código de transferencia radiativa de acceso público.

¹<http://home.strw.leidenuniv.nl/moldata/radex.html>

4.3. Modelado químico con el código de PDR Meudon

Para interpretar los procesos químicos en fase gas y el balance de energía de las regiones de fotodisociación, se ha utilizado una versión actualizada del código de Meudon^{II} para estudios fotoquímicos (e.g. Le Petit et al. 2006, Le Bourlot et al. 1993, Le Bourlot et al. 2012). Este modelo 1D de PDRs resuelve la transferencia radiativa FUV en un medio absorbente y difusivo de gas y polvo (Goicoechea & Le Bourlot 2007). Esto permite calcular el campo de radiación FUV en función de la profundidad de la nube teniendo en cuenta la absorción en el continuo por el polvo y las transiciones discretas de H y H₂, y las tasas de fotoionización y fotodisociación. El modelo también resuelve el balance térmico (teniendo en cuenta los procesos de calentamiento por efecto fotoeléctrico, reacciones exotérmicas, rayos cósmicos, etc. y el enfriamiento resultante de la emisión IR y mm de especies abundantes) y, por lo tanto, el perfil térmico a través de una PDR (ver Capítulo 3, Fig. 3.3). Una vez que se ha determinado la atenuación del campo de radiación

FUV y el perfil de temperatura, se calculan las abundancias químicas en estado estacionario para una red de reacciones químicas (~2800 reacciones en fase gas que incluyen ~130 especies). El código Meudon incluye reacciones de formación de moléculas orgánicas con hasta cuatro átomos de carbono. Se pueden hacer modelos isobáricos, isocóricos (densidad constante) y modelos con perfiles de densidad. En nuestros modelos se adopta un campo de radiación FUV $\chi = 2 \times 10^4$ veces el campo de radiación interestelar medio (ISRF) en unidades de Draine. El código Meudon se ha utilizado para comparar las abundancias observaciones con las teóricas en fase gas de hidrocarburos, moléculas orgánicas complejas e iones reactivos (Capítulos 7, 8 y 10, respectivamente) para investigar la química de estas especies. También para calcular el flujo de fotones FUV que producen la fotoisomerización cis-HCOOH \rightarrow trans-HCOOH (Capítulo 9).

^{II}https://ism.obspm.fr/?page_id=33

Parte II

Resultados:

Contenido molecular de la Barra de Orión

Capítulo 5

Observaciones milimétricas de la Barra de Orión

5.1. La Barra de Orión

La Barra de Orión es una de las PDRs iluminada por estrellas de alta masa más cercana, situada a ~ 414 pc (Menten et al. 2007), y es la interfase entre OMC-1 y la región HII que forma el cúmulo del Trapecio. OMC-1 es el emplazamiento de una de las regiones de formación estelar masivas más importantes y estudiadas de la galaxia (ver Sección 2.5). El cúmulo de estrellas más jóvenes forma la asociación OB del Trapecio. Las estrellas del Trapecio iluminan la Barra de Orión con un campo de radiación FUV de $\geq 10^4$ el campo interestelar medio (Marconi et al. 1998), lo que proporciona a la región unas propiedades químicas y físicas características. Imágenes en el óptico de la Nebulosa de Orión muestran una barra brillante localizada a $\sim 2'$ al sureste del cúmulo del Trapecio (Fig. 5.1, *izda.*).

Debido a su cercanía y a su orientación casi de canto, es posible hacer estudios sobre la estratificación espacial del gas en esta región, desde el gas ionizado hasta el gas neutro, en función de la distancia desde la fuente de ionización (e.g. Tielens et al. 1993; van der Werf et al. 1996; van der Wiel et al. 2009), e investigar la estructura y dinámica del gas molecular irradiado por altos flujos de radiación FUV (e.g. Goicoechea et al. 2016). Se han utilizado observaciones en múltiples longitudes de onda en diferentes posiciones de la Barra de Orión para el desarrollo de modelos de PDRs (e.g.

Tielens & Hollenbach 1985a,b). Estos modelos todavía se utilizan hoy en día como referencia para entender la emisión no resuelta de fuentes tan diferentes como el núcleo de galaxias con brotes de formación estelar (e.g. Fuente et al. 2008) o la superficie iluminada de discos protoplanetarios (e.g. O'Dell et al. 1993).

La morfología de la Barra de Orión fue deducida por primera vez por Hogerheijde et al. (1995) y Jansen et al. (1995) a través de observaciones en el rango milimétrico y submilimétrico de las especies moleculares CS, H₂CO y HCO⁺. A partir de las propiedades derivadas de estas especies, los autores interpretan que la Barra de Orión es una región con una densidad no homogénea compuesta por un medio extenso (*interclump*) de densidad $n_H \simeq 10^4 - 10^5$ cm⁻³ y temperatura típica de ~ 85 K, donde se encuentra $\sim 90\%$ del material molecular y desde donde surgen la mayor parte de las líneas de emisión moleculares de bajo número cuántico rotacional J . El resto del material estaría en forma de diversos cúmulos (*clumps*) con una densidad $n_H \geq 10^6$ cm⁻³. Esta estructura en cúmulos fue confirmada posteriormente con observaciones interferométricas (Lis & Schilke 2003, Young Owl et al. 2000). También se ha propuesto otra componente no resuelta espacialmente (pequeños *clumps* o filamentos), de mayor densidad

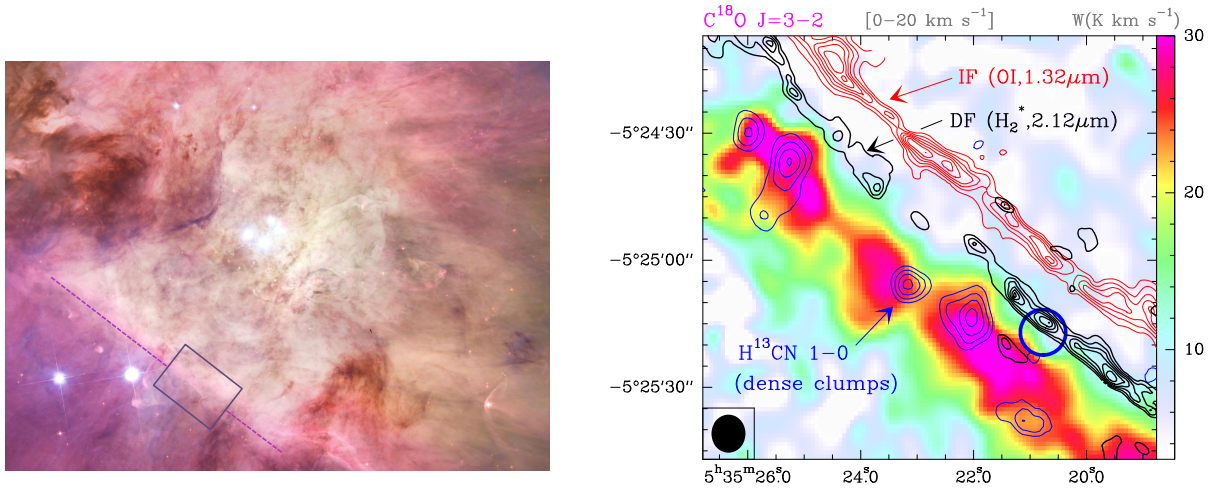


Figura 5.1: *Izda.* Imagen de la Barra de Orión iluminada por el cúmulo del Trapecio (línea punteada) tomada con la cámara WFPC2 del HST. Créditos: NASA, ESA, M. Robberto (Space Telescope Science Institute/ESA) y Hubble Space Telescope Orion Treasury Project Team. *Dcha.* Posición donde se ha llevado a cabo el barrido espectral de la Barra de Orión con el radiotelescopio IRAM-30m (círculo azul). En escala de colores se muestra la emisión en intensidad integrada de la línea $\text{C}^{18}\text{O } J = 3 \rightarrow 2$ (Cuadrado et al. 2017). Los contornos en negro muestran la emisión de $\text{H}_2^* \nu = 1 \rightarrow 0 \text{ S}(1)$ (frente de disociación; Walmsley et al. 2000). Los contornos en rojo muestran la emisión fluorescente de la línea de OI a $1.32 \mu\text{m}$ (frente de ionización; Walmsley et al. 2000). Los contornos azules muestran la posición de los núcleos de gas más densos (*clumps*) observados en $\text{H}^{13}\text{CN } J = 1 \rightarrow 0$ por Lis & Schilke (2003). A efectos ilustrativos se muestra el tamaño del haz de IRAM-30m a 1 mm en la esquina inferior izquierda.

($n_{\text{H}} \simeq 10^6 - 10^7 \text{ cm}^{-3}$) y temperatura ($T \simeq 160 - 220 \text{ K}$), para ajustar los trazadores de alta temperatura observados en esta región con *Herschel* en el IR lejano, como CO (de alto número cuántico J), CH^+ , OH o C_2H (de alto número cuántico N); Goicoechea et al. 2011, Nagy et al. 2015).

La Fig. 5.1 (*dcha.*) muestra la región de la Barra de Orión donde se han realizado las observaciones del barrido espectral con el telescopio IRAM-30m (círculo azul). La posición observada, con coordenadas $\alpha_{2000} = 05^{\text{h}} 35^{\text{m}} 20.8^{\text{s}}$, $\delta_{2000} = -05^{\circ} 25' 17.0''$, se corresponde con el frente de disociación (es decir, el borde iluminado de la nube molecular), próximo a la región HII generada por las estrellas del Trapecio. Esta posición es también conocida como el “pico de emisión de CO^+ ” (Störzer et al. 1995). En escala de colores se muestra la emisión en intensidad integrada (W en K km s^{-1}) de la línea $\text{C}^{18}\text{O } J = 3 \rightarrow 2$ observada con IRAM-30m a $\sim 329 \text{ GHz}$ (Cuadrado et al. 2017). Los contornos en negro muestran la emisión de $\text{H}_2^* \nu = 1 \rightarrow 0 \text{ S}(1)$ observado por Walmsley et al. (2000). El hidrógeno vibracionalmente excitado delinea el frente de disociación del H_2 . Los contornos en rojo muestran la emisión fluorescente de la línea de OI a $1.32 \mu\text{m}$

(Walmsley et al. 2000) y marca la posición del frente de ionización que separa la región HII y la nube neutra. Los contornos azules muestran la posición de núcleos de gas más denso (*clumps*) observados en $\text{H}^{13}\text{CN } J = 1 \rightarrow 0$ por Lis & Schilke (2003).

Las observaciones de líneas específicas en el submilimétrico de la Barra de Orión muestran la presencia de moléculas interestelares comunes como CS, CN, HCO^+ ... y también iones reactivos como CH^+ , OH^+ , CO^+ , HOC^+ , etc. que sólo surgen bajo condiciones extremas (alta temperatura, flujos de radiación UV elevados, etc.), por lo que son considerados trazadores de PDRs. Jansen et al. (1995) y Fuente et al. (1996) descubrieron que la abundancia de especies radicales (e.g. CN, C_2H , $\text{c-C}_3\text{H}_2$, etc.) e iones reactivos (e.g. CO^+) aumentan en las cercanías del frente de ionización de la Barra, mientras que la abundancia de las demás moléculas se incrementa hacia el interior de la nube molecular, más protegida de la radiación UV.

Se describen a continuación los barridos espectrales en los rangos milimétrico y submilimétrico, y otros trabajos previos al presentado en esta tesis, que han sido realizados

en distintas posiciones de la Barra de Orión con el fin de caracterizar químicamente esta región.

■ Hogerheijde et al. (1995) observaron en la Barra de Orión 53 líneas de 18 moléculas (CO , C^{18}O , C^{17}O , CO^+ , SO , SiO , CN , CS , C^{34}S , NO , C_2H , HCO^+ , H^{13}CO^+ , HCN , HNC , H_2S , H_2CO y CH_3OH) con los telescopios JCMT, CSO e IRAM-30m en varias frecuencias en el rango milimétrico y submilimétrico (entre 90 – 492 GHz). Este estudio se realizó en cinco posiciones perpendiculares a la Barra, una de ellas a $(\Delta\alpha, \Delta\delta) = (-7'', 7'')$ de la posición observada en nuestro barrido espectral. Con los resultados obtenidos estudiaron las condiciones físicas y químicas con una extinción visual creciente, desde la región HII hasta la nube molecular, deduciendo la morfología de la Barra de Orión por primera vez.

■ Schilke et al. (2001) detectaron tres líneas de SiO en varias posiciones de la Barra de Orión con IRAM-30m. Observaron emisión extendida de esta molécula en toda la región, y en algunas posiciones hay evidencia de que las líneas observadas se han formado en los *clumps*. Los autores concluyen que las PDRs muestran una abundancia mayor de moléculas que transportan elementos refractarios debido a la desintegración del grano causada por el elevado flujo de radiación FUV. En sus observaciones detectan también una línea de estructura hiperfina del HCO confirmando que esta especie es abundante en PDRs (Schenewerk et al. 1988).

■ Leurini et al. (2006) investigaron la emisión molecular en el rango de frecuencias de 279 – 308 GHz con el telescopio de 12 m APEX en dirección a una condensación densa (*clump*) tras el frente de disociación (el *clump* #3 de Lis & Schilke 2003). Presentan la detección de ~ 40 líneas de 13 moléculas (SO , SO^+ , CS , C^{33}S , C^{34}S , NS , DCN , H^{13}CN , HCS^+ , H_2S , H_2CO , H_2CS y CH_3OH). A través de un análisis LVG de las líneas rotacionales de H_2CO y CH_3OH concluyeron que estas especies trazan dos ambientes distintos de la Barra: el CH_3OH traza los *clumps* más densos y fríos del interior de la PDR, y el H_2CO el *interclump* directamente expuesto a la radiación FUV. Estos resultados fueron posteriormente confirmados por Leurini et al. (2010).

■ Neufeld et al. (2006) detectaron por primera en el medio interestelar el ion CF^+ en varias posiciones de la Barra de Orión con los telescopios IRAM 30m y APEX.

■ van der Wiel et al. (2009) presentan mapas de la emisión molecular de varias especies en una región de $2' \times 2'$ con una resolución de $14'' - 23''$ realizados con el telescopio JCMT. Los datos y modelos confirman la estratificación química de la región: los máximos de emisión de C_2H $4_{9/2} \rightarrow 3_{7/2}$ y $4_{7/2} \rightarrow 3_{5/2}$ son los más próximos al frente de ionización, seguido por H_2CO $5_{1,5} \rightarrow 4_{1,4}$ y SO $8_8 \rightarrow 7_8$, mientras que C^{18}O $2 \rightarrow 1$, HCN $3 \rightarrow 2$ y ^{13}CO $3 \rightarrow 2$ tienen su máximo de emisión en zonas más profundas de la nube.

■ Parise et al. (2009) investigaron el mecanismo de formación de tres moléculas deuteradas (DCN , DCO^+ y HDCO) en dos *clumps* densos de la Barra de Orión con observaciones realizadas con los telescopios APEX e IRAM 30m. Basándose en modelos de química en fase gas concluyen que el mecanismo más probable de formación de especies deuteradas en la Barra es a través de la transferencia de deuterio del ion CH_2D^+ en fase gas.

■ Habart et al. (2010) realizaron un barrido espectral de baja resolución ($>0.04 \text{ cm}^{-1}$ o 1.2 GHz) entre 447 – 1545 GHz con el instrumento SPIRE de Herschel. Identificaron líneas pertenecientes a nueve especies moleculares (CO , ^{13}CO , C^{18}O , C^{17}O , CH^+ , CH , H_2O , HCO^+ y H_2S) y varias líneas de estructura fina de Cl y Ni a $(\Delta\alpha, \Delta\delta) = (30'', 19'')$ de la posición de observación de nuestro barrido espectral.

■ Nagy et al. (2017) realizaron un barrido espectral con Herschel/HIFI en un rango de frecuencias entre 480 – 1250 GHz y 1410 – 1910 GHz en el pico de emisión de CO^+ . Basado en este barrido espectral, se han publicado varios artículos que analizan varias moléculas de interés: (i) Van der Tak et al. (2012) publicaron la primera detección de la emisión de HF en una fuente interestelar galáctica. (ii) Nagy et al. (2013) analizaron las propiedades los iones reactivos CH^+ y SH^+ , y (iii) Van der Tak et al. (2013) de OH^+ . (iv) Choi et al. (2014) calcularon un ratio ortopara del H_2O para estudiar su mecanismo de formación en PDRs. El bajo valor obtenido (entre 0.1 – 0.5) es inconsistente con la formación en fase gas o mediante evaporación térmica de los granos de polvo, por lo que los autores sugieren que la formación de H_2O en la Barra de Orión podría explicarse por un mecanismo de fotodesorción de los

granos de polvo. (v) Nagy et al. (2015) analizaron seis transiciones de alto número cuántico N del hidrocarburo C_2H concluyendo que las transiciones de más alto número cuántico N podrían estar trazando una componente más densa y

caliente de la Barra, como el borde los clumps expuestos a la radiación FUV cerca del frente de ionización de la Barra de Orión.

5.2. Barrido espectral de la Barra de Orión con IRAM-30m

5.2.1. Importancia de los barridos espectrales

Los barridos espectrales son una herramienta importante en el campo de la astroquímica ya que permiten una caracterización química completa de la región objeto de estudio. Hasta la fecha se han detectado casi 200 moléculas en el medio interestelar y circunestelar, y muchas de ellas han sido detectadas únicamente en el espacio debido a que su alta reactividad e inestabilidad hacen que sea imposible que permanezcan sin reaccionar bajo las condiciones físicas de la Tierra. Un barrido espectral de una PDR como la Barra de Orión ofrece la oportunidad de determinar el contenido químico en ambientes irradiados por intensos campos de radiación FUV y constituye un laboratorio ideal para la detección de nuevas moléculas en el espacio.

Los barridos espectrales, entre otras cosas, permiten:

- Elaborar un censo completo de las moléculas presentes en la región de estudio, lo que permitirá comparar la riqueza química entre los distintos ambientes interestelares.

- Detectar nuevas especies químicas. Para poder detectar una nueva especie es necesario observar varias de sus transiciones, por lo que un barrido espectral que abarque un amplio rango de frecuencias ofrece la ocasión de detectar distintas transiciones de una misma molécula.

- Estudiar las propiedades físicas del gas (densidad, temperatura, turbulencia...) a partir de la detección de varias transiciones de una misma molécula.

- Comparar las abundancias relativas de las distintas especies detectadas para obtener una visión global de los procesos químicos producidos en la región.

- Estudiar los perfiles de las líneas (en la medida que la resolución espectral lo permita) para determinar si en la región de estudio existen procesos dinámicos como turbulencia o choques.

- Comparar las abundancias de diferentes especies isotópicas de una molécula para obtener información sobre el reciclado del material estelar, estado evolutivo, procesos químicos...

Hasta hace poco sólo se podían realizar barridos espectrales de las fuentes más brillantes porque el limitado ancho de banda y la sensibilidad de los instrumentos no lo permitían. Al aumentar estos dos factores, han aumentado los barridos espectrales en distintas regiones de interés astroquímico causando un gran impacto en nuestro conocimiento del contenido molecular de las nubes del medio interestelar, envolturas circunestelares e incluso en otras galaxias (e.g. Cernicharo et al. 2000, 2010, 2013, 2016; Martín et al. 2006, 2011; Beloeche et al. 2008, 2013; Tercero et al. 2010; Bergin et al. 2010; Aladro et al. 2011, 2013; Ginard et al. 2012; Velilla-Prieto et al. 2016; Nagy et al. 2017).

5.2.2. Observaciones

Con el objetivo de investigar el contenido molecular existente en una región de la Barra de Orión muy cercana al frente de disociación (ver Sección 5.1), se inició en el año 2009 un barrido espectral con el radiotelescopio IRAM (*Institut de Radio Astronomie Millimetrique*) de 30 m de diámetro, que se encuentra situado a 2850 m de altitud en Pico Veleta, en Sierra Nevada (Granada, España). IRAM-30m es uno de los radiotelescopios más grandes y más sensibles en el dominio de las ondas milimétricas. Hemos observado más de 100 h en distintas campañas de observación desde 2009 hasta 2015.

Para la realización de las observaciones se han empleado los nuevos receptores EMIR (con dos polarizaciones ortogonales) que abarcan las cuatro principales ventanas atmosféricas en el rango milimétrico (Fig. 5.2). Las cuatro bandas EMIR se designan como E090, E150, E230 y E330

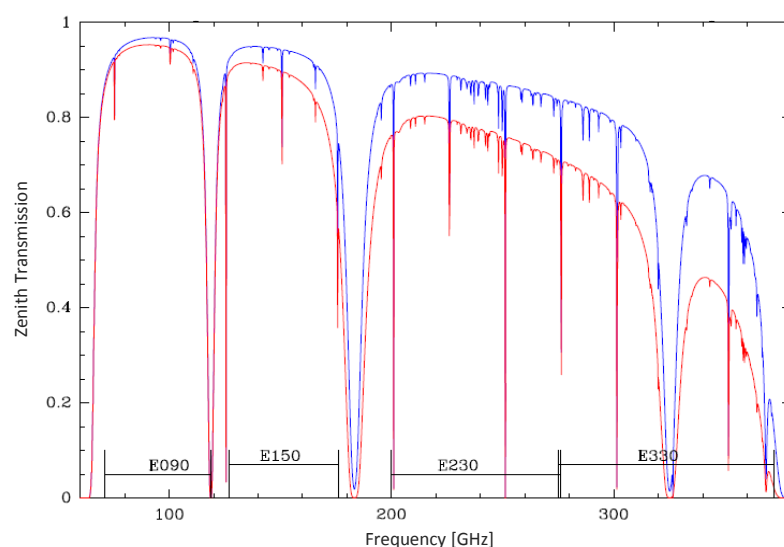


Figura 5.2: Transmisión atmosférica entre 60 – 400 GHz para dos valores de vapor de agua precipitable (2 mm y 4 mm). Se señalan los rangos de frecuencia de las cuatro bandas EMIR

(o E0, E1, E2 y E3 de forma abreviada) de acuerdo con su frecuencia central en GHz. Los receptores EMIR (Carter et al. 2012) son mezcladores heterodinos en los que la señal de alta frecuencia procedente de la fuente astronómica se combina con una señal artificial y monocromática proporcionada por el oscilador local (LO). En esta combinación, $\nu_{\text{fuente}} \pm \nu_{\text{LO}}$, se obtienen dos señales, una correspondiente a la suma de la señal de la fuente y la del oscilador local, y otra la resta (en valor absoluto) de las dos señales. Esta última señal de menor frecuencia, llamada frecuencia intermedia (IF), es la que se utiliza para poder trabajar en condiciones óptimas de transmisión y puede ser posteriormente amplificada sin pérdida de información espectral. La primera señal de mayor frecuencia (conocida con el nombre de banda imagen) es atenuada mediante dispositivos electrónicos hasta -13 dB. Dependiendo de si esta señal se atenúa antes o después de llegar al conversor de frecuencias tendremos un sistema receptor de banda simple (SSB) o de banda doble (2SB, porque procesa simultáneamente las dos señales), respectivamente. El receptor E1 estaba configurado en SSB (cubriendo un ancho de banda instantáneo de 8 GHz por polarización) y los receptores E0, E2 y E3 en 2SB (16 GHz por polarización). La señal es amplificada y enviada a los espectrómetros (comúnmente conocidos como *backends*) para su posterior tratamiento y análisis. El espectro resultante tiene que pasar finalmente los procesos de calibrado para transformar la señal en unidades de temperatura de antena (T_A^* ,

Rohlfs & Wilson 1986) y ser corregidos de la absorción atmosférica. La calibración en esta escala de intensidades se lleva a cabo usando dos absorbentes a distintas temperaturas (carga fría y caliente) y el código de transmisión atmosférica desarrollado por Cernicharo (1985) y actualizado por Pardo et al. (2001).

En nuestras observaciones se han empleado los tres *backends* de IRAM-30m (VESPA, WILMA y FFTS), que se diferencian en su resolución espectral y en el ancho de banda.

■ **VESPA** (*VErsatile SPectrometer Array*) proporciona diferentes configuraciones dependiendo del ancho de banda y de la resolución espectral necesaria. Es importante obtener el máximo ancho de banda posible para cubrir todo el rango de frecuencias del barrido espectral en el menor tiempo posible, pero también se tiene que tener en cuenta la resolución espectral ya que las líneas moleculares de la PDR son relativamente estrechas (anchos de línea típicos de $\Delta\nu \leq 2 \text{ km s}^{-1}$) y se necesita una alta resolución espectral para resolverlas. La configuración óptima que proporciona una resolución espectral de 80 kHz ($\delta\nu \simeq 0.1 \text{ km s}^{-1}$ y $\delta\nu \simeq 0.3 \text{ km s}^{-1}$ en la región espectral de 1 mm y 3 mm, respectivamente), se corresponde con un ancho de banda de 480 MHz.

■ **WILMA** (*Wideband Line Multiple Autocorrelator*) posee una resolución espectral de 2 MHz por canal y propor-

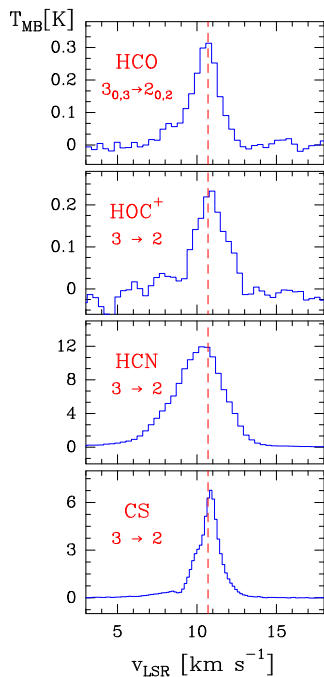


Figura 5.3: Ejemplo de las líneas resueltas en velocidad en la Barra de Orión obtenidas con VESPA en la banda de 1 mm (HCO, HOC⁺ y HCN con $J = 3 \rightarrow 2$) y 2 mm (CS $J = 3 \rightarrow 2$). Se pueden apreciar diferentes anchuras de línea y perfiles asimétricos en cada línea.

ciona un ancho de banda de 8 GHz por polarización. WILMA permite cubrir amplios rangos de frecuencia en poco tiempo. Sin embargo, WILMA tiene una baja resolución espectral en velocidad ($\delta v \simeq 3 \text{ km s}^{-1}$ y $\delta v \simeq 6 \text{ km s}^{-1}$ en la región espectral de 1 mm y 3 mm, respectivamente), por lo que las líneas no están espectralmente resueltas.

■ **FFTS** (*Fast Fourier Transform Spectrometer*): Gracias a los nuevos instrumentos FFTS (Klein et al. 2012), cuya instalación se concluyó a finales del 2011, pueden obtenerse rápidamente barridos espectrales de alta resolución espectral ($\delta v \simeq 0.3 \text{ km s}^{-1}$ a $\sim 230 \text{ GHz}$) con un ancho de banda de 16 GHz en cada polarización.

Las primeras observaciones se realizaron con los receptores E0 (80 – 118 GHz), E1 (128 – 176 GHz) y E3 (solo algunas frecuencias entre 258 – 282 GHz) y el espectrómetro WILMA. WILMA permite cubrir amplios rangos de frecuencia en un tiempo reducido de observación, pero su resolución espectral no es suficiente para resolver espectralmente las líneas estrechas de la PDR ($\Delta v \lesssim 2 \text{ km s}^{-1}$). Cuando comenzamos las observaciones de la Barra de Orión con el espectrómetro WILMA, conectamos también el espectrómetro VESPA en determinados rangos de frecuencia

para poder estudiar los perfiles intrínsecos de las líneas moleculares con alta resolución espectral. Estas observaciones revelaron perfiles asimétricos en algunas líneas (Fig. 5.3), probablemente asociadas con la cinemática de la PDR.¹ En el año 2012, con la puesta en funcionamiento de los nuevos espectrómetros FFTS, se volvió a observar el rango de frecuencias del receptor E0 (ya que es la banda donde detectamos un mayor número de líneas moleculares) y se completaron los rangos de frecuencias abarcados por los receptores E2 y E3 a alta resolución espectral. Con las observaciones realizadas con los FFTS se pretendía resolver espectralmente los perfiles de las líneas y detectar las líneas débiles que se encuentran espectralmente diluidas por la baja resolución de WILMA (nuevas moléculas, isotopólogos, nuevas transiciones de moléculas ya detectadas...). A lo largo de varias campañas de observación se han completado las bandas espectrales de 3 mm, 2 mm, 1 mm y 0.9 mm cubriendo un total de 217 GHz.

En la Fig. 5.4 se puede apreciar la diferencia entre las líneas espectralmente resueltas de los FFTS y las obtenidas con WILMA. La resolución espectral de WILMA no permite que se resuelvan los estrechos perfiles de las líneas

¹Los datos obtenidos con los espectrómetros VESPA y WILMA nos permitieron realizar un análisis preliminar del contenido molecular de esta región. Estos resultados se presentaron en mi trabajo Fin de Máster para optar al título de Máster en Astrofísica en la Universidad Autónoma de Madrid en Junio de 2012.

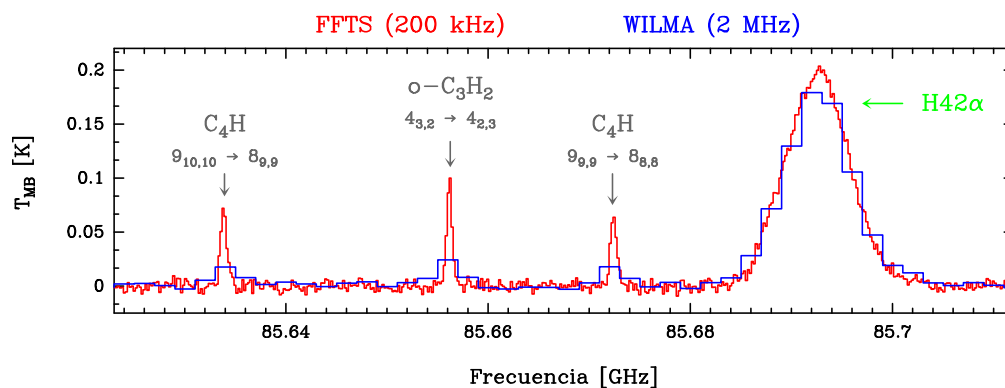


Figura 5.4: Efectos de la resolución espectral en líneas no resueltas. FFTS (histograma rojo), con una resolución espectral de 200 kHz, es capaz de resolver espectralmente las líneas estrechas de la PDR. Debido a que la anchura de los canales del espectrómetro WILMA (2 MHz de resolución espectral) es mayor que la anchura intrínseca de las líneas, la emisión molecular está espectralmente diluida: la anchura observada de la línea aumenta y disminuye la intensidad del pico la línea (el área integrada se conserva). Las líneas de recombinación de hidrógeno (intrínsecamente más anchas que las líneas moleculares, ver Capítulo 11) sí están resueltas espectralmente tanto con WILMA como con los FFTS.

moleculares de la PDR, y por lo tanto las observaciones realizadas con WILMA solo proporciona información sobre la intensidad integrada de línea. La mayoría de las líneas moleculares se han observado con los *backends* FFTS que sí permiten resolver espectralmente las líneas moleculares, proporcionando así información del perfil de las líneas. Las líneas de recombinación de hidrógeno y helio procedentes del gas ionizado de la región HII adyacente se resuelven con ambos *backends* porque tienen una anchura intrínseca mucho mayor que las líneas moleculares ($\Delta v \simeq 25 \text{ km s}^{-1}$).

Las observaciones se realizaron con el método de “*position switching*” que consiste en alternar observaciones dentro de la fuente y hacia una zona del cielo libre de emisión molecular (pero cerca de la fuente para evitar variaciones atmosféricas y degradación en la observación) con el fin de eliminar las variaciones en el tiempo del cielo y otros efectos instrumentales. En este método de observación se puede mover sólo el sub-reflector (“*wobbler switching*”) cuando se van a realizar desplazamientos pequeños ($\lesssim 1'$, e.g. en observaciones de envolturas circunestelares) o todo el telescopio, como en el caso de nuestras observaciones ($10'$) debido a la extensa emisión molecular en la Nube de Orión (de varios minutos de arco). Los espectros obtenidos con este último método de observación son de peor calidad ya que las variaciones atmosféricas entre las dos posiciones son mayores, lo que repercute en la estabilidad de la línea de base complicando el proceso de reducción de datos.

Cada *scan* se repitió a una frecuencia desplazada 50 MHz (no es necesario realizar una nueva sintonización ya que es una variación de frecuencia mínima) para identificar las líneas procedentes de la banda imagen y poder eliminarlas en el proceso de reducción de datos. Las líneas de la banda imagen se identifican fácilmente porque tienen frecuencias distintas en ambos *scans* y están separadas 100 MHz. La verificación del apuntado del telescopio se comprobó cada 2 h con observaciones en el continuo de una fuente intensa y cercana a la Barra de Orión (el cuásar 0420–014). El estado del foco se revisó cada 4 h sobre un planeta.

Para obtener una excelente relación Señal/Ruido (*S/N*, *Signal/Noise*) y poder detectar las líneas más débiles es necesario que el tiempo de integración sobre la fuente sea elevado. El tiempo de integración total fue $\sim 3 - 5$ h para cada rango de frecuencia observado. También es importante tener en cuenta que las condiciones atmosféricas adversas durante las observaciones (viento, altas concentraciones de vapor de agua en la atmósfera...) influyen negativamente en la calidad de los datos (líneas de base de poca calidad, espectros ruidosos...). Este proyecto se observó con unas condiciones atmosféricas excelentes ($\tau \simeq 0.1$) con el receptor E3, buenas ($\tau \simeq 0.3 - 0.2$) con el receptor E2, y medias ($\tau \simeq 0.4 - 0.3$) con los receptores E0 y E1 (ver en la Fig. 5.2 como varía la transmisión atmosférica con el aumento del vapor de agua en la atmósfera).

5.2.3. Proceso de reducción de datos

Los espectros fueron reducidos y analizados utilizando el programa CLASS (*Continuum and Line Analysis Single-dish Software*), que forma parte del paquete GILDAS (*Grenoble Image and Line Data Analysis Software*) para la reducción de datos radioastronómicos desarrollado en IRAM.

El proceso de reducción de los espectros ha consistido en:

1. Se revisa cada observación individualmente (*scans*) para desechar aquellos de baja calidad (i.e. espectros afectados por malos apuntados o focos, por malas condiciones atmosféricas o por inestabilidades del receptor). Las observaciones se han configurado para obtener (para un intervalo de frecuencias y una polarización determinada) 12 *subscans* de 8 min cada uno (con el método de “position switching” el telescopio está 8 min en la fuente y otros 8 min fuera de ella por cada *subscan*). Cada *scan* (compuesto de 12 *subscans* promediados automáticamente en el momento de la observación) ya está calibrado en temperatura de antena y corregido de la absorción atmosférica (T_A^*).

2. Se suman todos los scans obtenidos para una misma frecuencia central y una misma polarización, para obtener el espectro con una relación S/N alta. El ruido rms (*root mean square*) de nuestras observaciones obtenidas por integración durante ~ 4 h oscila entre 4 – 20 mK (en un ancho de banda de ~ 25 MHz) en unidades de temperatura de antena.

3. Se ajusta una línea de base polinomial a cada espectro de ~ 200 MHz de ancho para obtener los espectros al cero de intensidad del continuo y poder obtener directamente la intensidad de las líneas. Es conveniente utilizar un polinomio de bajo orden y hay que tener cuidado de no modificar los perfiles de las líneas. Los problemas de “*platforming*” (variación en el nivel del continuo en algunas sub-bandas del espectro debido a una mala alineación de las unidades de FFTS) se solucionaron en este paso ajustando una línea de base a cada sub-banda del espectro.

4. Se comparan de las polarizaciones H y V. En muchas ocasiones es difícil distinguir las líneas más débiles del ruido que las rodea, y comparar las dos polarizaciones puede ayudar a detectar o descartar la presencia de líneas. Al observarse simultáneamente ambas polarizaciones, las líneas moleculares serán idénticas en ambas polarizaciones (Horizontal y Vertical) y solo variará el ruido.

5. Eliminación de las líneas procedentes de la banda imagen. Se compara cada par de *scans* desplazados ~ 50 MHz. El cambio de frecuencia de las líneas que proceden de la banda imagen al desplazar la frecuencia central de los receptores permite identificar todas las líneas contaminantes de la banda imagen. A pesar de la buena atenuación de los receptores del telescopio IRAM-30m, alguna de las líneas más intensas como CO, ^{13}CO , CS, CN, SO, HCN, HCO^+ ... producen una línea de la banda imagen de intensidad no despreciable (entre 0.01 – 0.8 K) que hay que eliminar.

6. Eliminación de canales malos. Algunos canales del receptor estaban dañados y se obtenían líneas con valores anómalos de intensidad (con una anchura típica de 1 – 4 canales y la intensidad de pico $\gtrsim 5\sigma$). Pueden identificarse en la revisión de cada *scan* ya que tienen intensidades positivas y negativas. En el barrido espectral realizado con el receptor E3 se han tenido que eliminar más de 20 señales que procedían de canales malos y más de 10 señales de cada barrido realizado con los receptores E1 y E0.

7. Se suman las dos polarizaciones y cada par de espectros desplazados ~ 50 MHz. Si el ruido de ambas polarizaciones es comparable se pueden sumar ambos espectros aumentando de nuevo la relación S/N de las observaciones. En algunos casos, los espectros de frecuencias mayores de 128 GHz mostraron un exceso de ruido en alguna de las polarizaciones, especialmente en la polarización vertical, a veces acompañados de armónicos simétricos alrededor de líneas fuertes. Como ambas polarizaciones no eran comparables, la detección de líneas débiles se hizo especialmente difícil.

8. Se convierte la temperatura de antena, T_A^* , a temperatura del haz principal, T_{MB} . Para obtener una escala de intensidades en temperatura del haz principal o main beam temperature (T_{MB}), apropiada para la emisión relativamente compacta de la Barra de Orión (en comparación con los lóbulos secundarios del haz), se utiliza la expresión:

$$T_{\text{MB}} = T_A^* \cdot \eta_{\text{MB}} , \quad (5.1)$$

donde T_{MB} es la temperatura de brillo de una fuente equivalente que llenase el haz principal y η_{MB} es la eficiencia de la antena que se define como el ratio entre la eficiencia frontal (F_{eff}) y la eficiencia del haz principal (B_{eff}), que de-

Frec.	HPBW	F_{eff}	B_{eff}	$F_{\text{eff}}/B_{\text{eff}}$
[GHz]	[arcsec]	[%]	[%]	
86	29	95	81	1.17
145	16	93	74	1.26
210	11	94	63	1.49
260	9	88	53	1.66
340	7.5	81	35	2.31

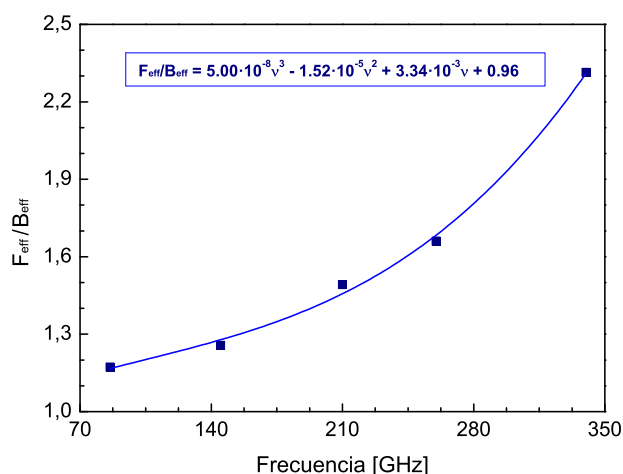


Figura 5.5: *Izda:* Tabla con las eficiencia frontales (F_{eff}), las eficiencias del haz (B_{eff}), y el tamaño del haz (HPBW) del telescopio IRAM-30m en función de la frecuencia. Valores obtenidos de <http://www.iram.es/IRAMES/mainWiki/Iram30mEfficiencias>. *Dcha:* Ajuste polinómico de η_{MB} en función de la frecuencia para convertir las intensidades de las líneas de T_{A}^* a T_{MB} .

penden de la frecuencia y del tamaño del haz principal del telescopio (HPBW, *Half-Power Beam Width*). Estos parámetros están tabulados en función de la frecuencia para el telescopio IRAM-30m (ver Fig. 5.5).

Una vez obtenidos los espectros finales, se pueden editar empleando el programa GREG (*GRE*noble *GR*aphic). GREG es un programa de diseño gráfico que permite entre otras cosas, unir todos los espectros obtenidos, modificar las unidades de los ejes, etiquetar las líneas...

En la Tabla 5.1 se muestra un resumen de las observaciones del barrido espectral de la Barra de Orión, donde se muestra la variación de la resolución espectral, las eficiencias y el tamaño del haz principal de la antena en función de la frecuencia, y el número de líneas detectadas en cada banda espectral. El mayor número de líneas se detecta a 3 mm. El número de líneas detectadas a 2 mm no es muy elevado porque la resolución espectral con la que se observó este rango de frecuencias es muy baja ($\delta\nu \simeq 4.7 - 3.4 \text{ km s}^{-1}$) y solo se han detectado las líneas más intensas. La densidad de líneas es, en promedio, 6 líneas/GHz a 3 mm, 4 líneas/GHz a 2 mm y 1 mm y 2 líneas/GHz a 0.9 mm. La Fig. 5.6 muestra el barrido espectral completo en las bandas espectrales de 3 mm, 2 mm, 1 mm y 0.9 mm. Se muestra la

identificación de las líneas moleculares y de recombinación más intensas. Los espectros están dominados por la emisión de una docena de especies cuyas líneas tienen una intensidad $T_{\text{MB}} > 2 \text{ K}$: CO, ^{13}CO , C^{18}O , C^{17}O , CS, SO, CN, HCO^+ , HCN, HNC, C_2H y H_2CO .

5.2.4. Identificación de líneas

La identificación de las líneas moleculares se ha realizado utilizando el catálogo espectral de J. Cernicharo (código MADEx, Cernicharo 2012). Se utilizaron también dos bases de datos moleculares de acceso público: JPL^{II} y CDMS^{III}. Para la identificación de las líneas de recombinación se ha empleado el catálogo de líneas publicado en la tesis de A. Baez-Rubio (UCM, 2015).

Para realizar la identificación de una línea se ha seguido el siguiente procedimiento:

1. Se determina la frecuencia de la línea en su centro y se buscan transiciones moleculares que se produzcan en un rango de frecuencias de $\pm 2 \text{ MHz}$ en torno a la frecuencia de la línea observada. La identificación molecular se realiza de acuerdo a criterios de energía (e.g. transiciones con ener-

^{II}Pickett et al. 1998; <http://spec.jpl.nasa.gov/>

^{III}Müller et al. 2001, 2005; <http://www.astro.uni-koeln.de/cdms/>

Tabla 5.1: Frecuencias observadas y parámetros del telescopio.

Receptores ^a	Espectrómetros	Frecuencias ^b [GHz]	$\delta\nu$ ^c [km s ⁻¹]	η_{MB} ^d	HPBW ^e [arcsec]	Nº Líneas ^f
E0	FFTS	80 – 117	0.75 – 0.51	0.87 – 0.82	31 – 21	~ 220
E1	WILMA	128 – 176	4.7 – 3.4	0.80 – 0.74	19 – 14	~ 200
E2	FFTS	202 – 275	0.30 – 0.22	0.70 – 0.56	12 – 9	~ 300
E3	FFTS	275 – 305	0.22 – 0.20	0.56 – 0.50	9 – 8	~ 90
	FFTS	328 – 359	0.18 – 0.17	0.46 – 0.40	8 – 7	~ 70

Notas. ^a Receptores EMIR. ^b Rango de frecuencias observado. ^c Resolución espectral en unidades de velocidad ($\delta\nu$) en los rangos de frecuencia observados. ^d Eficiencias de la antena. ^e El tamaño del haz del telescopio (HPBW, *Half Power Beam Width*) se ajusta con la siguiente expresión: $\text{HPBW}[\text{arcsec}] \approx 2460/\text{Frecuencia}[\text{GHz}]$. ^f Número de líneas detectadas en cada banda.

gías del nivel superior $E_u/k < 200$ K), número y abundancia relativa de átomos que forman la molécula, intensidad intrínseca de la línea o del coeficiente de Einstein para la emisión espontánea.

2. Se comprueba la presencia de otras transiciones esperadas de la molécula seleccionada en otras frecuencias.

3. Por último, para confirmar la identificación, se utiliza el código MADEx para crear modelos LTE que simulen la emisión de las diferentes líneas rotacionales de la misma especie a diferentes frecuencias y compararlas con los espectros observados.

5.2.5. Resultados

Nuestro barrido espectral del frente de disociación de la Barra de Orión evalúa los límites de la complejidad química en ambientes fuertemente irradiados por radiación FUV. Cubre un ancho de banda de ~220 GHz, entre 80 GHz y 359 GHz, en el que se han detectado más de 850 líneas (incluidas las detecciones tentativas). Se pensaba que estas regiones estarían dominadas por especies simples, a diferencia de los *hot cores* donde se detectan fácilmente moléculas orgánicas complejas (Tercero et al. 2010), pero nuestras observaciones muestran que esta región posee una notable riqueza química. Se han detectado ~60 especies moleculares con hasta siete átomos en el borde de la PDR, incluyendo moléculas simples que son comunes en el medio interestelar (e.g. CO, CS, SO₂), radicales (e.g. CN, HCO), iones reactivos (e.g. HOC⁺, SH⁺), hidrocarburos (e.g. C₂H, 1-C₃H⁺, c-

C₃H₂), moléculas complejas (e.g. CH₃CN, CH₃CHO), isotopólogos (D, ¹³C, ¹⁸O, ¹⁷O, ³⁴S, ³³S y ¹⁵N) y numerosas líneas de recombinación de carbono, hidrógeno y helio. Sólo se han detectado transiciones rotacionales en el estado vibracional del nivel fundamental y no se han identificado líneas de aniones. En la Tabla 5.2 se muestran las moléculas detectadas en el barrido espectral clasificadas por el número de átomos.

En la Fig. 5.7 se muestran los espectros detallados del barrido espectral, con escalas de frecuencia ampliadas. Cada línea se identifica con su fórmula molecular o atómica y sus correspondientes números cuánticos. Aproximadamente el 98 % de las líneas detectadas se han asignado a transiciones rotacionales de moléculas conocidas y líneas de recombinación, pero ~15 líneas permanecen aún sin identificar (indicadas por la letra U en la Fig. 5.7). Aunque algunas líneas tienen intensidades inferiores al nivel de ruido 3 σ , se han incluido en los resultados ya que también se detectan otras transiciones de la misma molécula. Además, su baja intensidad es consistente con los modelos de excitación. En el Apéndice B se muestran todas las líneas moleculares y de recombinación detectadas en el barrido espectral ordenadas por frecuencia.

Las especies con mayor número de líneas en el barrido espectral son: (i) CN con 66 líneas de tres isotopólogos (CN, ¹³CN y C¹⁵N), (ii) c-C₃H₂ con 50 líneas, (iii) CH₃OH con 55 líneas, (iv) CH₃CN con 44 líneas, (v) SO con 38 líneas de dos isotopólogos (SO y ³⁴SO).

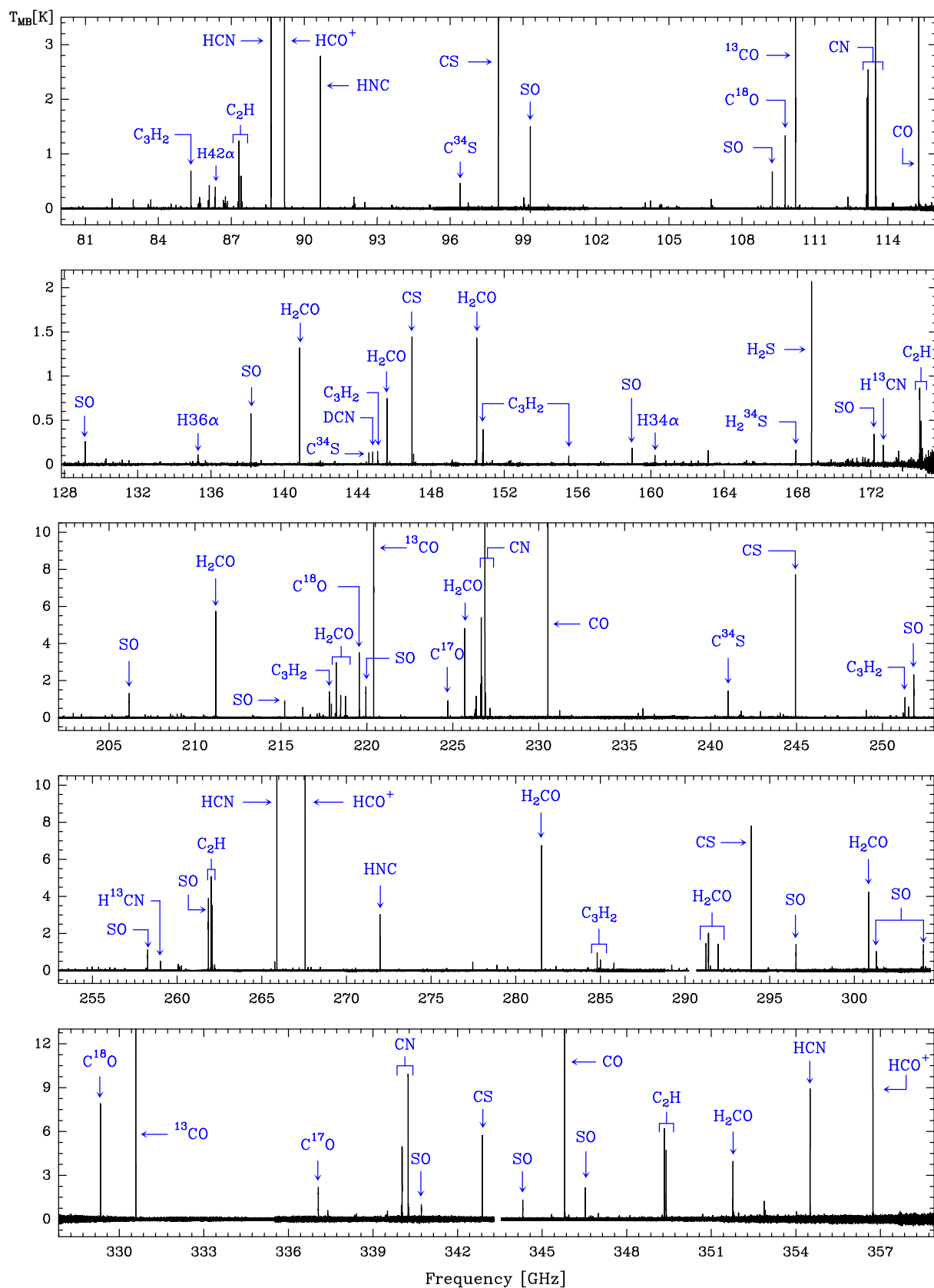


Figura 5.6: Barrido espectral en la región de fotodisociación de la Barra de Orión. Los espectros están dominados por la emisión de una docena de especies: CO , ^{13}CO , C^{18}O , C^{17}O , CS , SO , CN , HCO^+ , HCN , HNC , C_2H y H_2CO (con $T_{MB} > 2$ K).

Tabla 5.2: Moléculas detectadas en el barrido espectral de la Barra de Orión.

2 Átomos		3 Átomos		4 Átomos		5 Átomos	6 Átomos	7 Átomos
CO	¹³ CO	C ₂ H	¹³ CCH	c-C ₃ H		C ₄ H	CH ₃ OH	CH ₃ CHO
	C ¹⁸ O		C ¹³ CH	l-C ₃ H		c-C ₃ H ₂	CH ₃ CN	
	C ¹⁷ O	HCO		l-C ₃ H ⁺		l-H ₂ C ₃		
	¹³ C ¹⁸ O	HCO ⁺	H ¹³ CO ⁺	H ₂ CO	H ₂ ¹³ CO	HC ₃ N		
	¹³ C ¹⁷ O*		HC ¹⁸ O ⁺	H ₂ CS		HCOOH		
CO ⁺			DCO ⁺ *	HNCO		H ₂ CCO		
SO	³⁴ SO	HOC ⁺				CH ₂ NH		
SO ⁺		HCS ⁺						
SiO		OCS						
CN	¹³ CN	HCN	H ¹³ CN					
	C ¹⁵ N		DCN					
NS			HC ¹⁵ N					
CS	¹³ CS	HNC	HN ¹³ C					
	C ³⁴ S		H ¹⁵ NC					
	C ³³ S		DNC*					
	¹³ C ³⁴ S*	SO ₂						
CF ⁺		H ₂ S	H ₂ ³⁴ S					
SH ⁺		N ₂ H ⁺						
NO								

Notas. * Detección tentativa, solo se ha detectado una línea a $2\sigma - 3\sigma$.

A continuación se describen en más detalle los principales resultados obtenidos del barrido espectral.

a. Moléculas simples

Entre las especies observadas en el barrido espectral se encuentran moléculas sencillas (la mayoría radicales) comunes del medio interestelar: CO, CN, NO, CS, NS, SO, SO₂, HCN, HNC, OCS y H₂S. También se han detectado cationes comunes: HCO⁺, HCS⁺ y N₂H⁺. Destaca la presencia de SiO, una molécula característica de regiones con choques ya que su formación se asocia con la destrucción de los granos de polvo en choques rápidos (Gusdorf et al. 2008; Guillet et al. 2009). Las líneas más intensas pertenecen a especies como CO, ¹³CO, CN, CS, HCO⁺, HCN, H₂CO y C₂H, mientras que especies como HCS⁺, OCS, H₂S y las lí-

neas de los isotopólogos menos abundantes muestran líneas más débiles. En el Capítulo 6 se muestran los resultados del análisis este grupo de especies.

b. Hidrocarburos

Los radicales hidrocarbonados son muy abundantes en el borde de la PDR. Hemos detectado más de 200 líneas pertenecientes a C₂H, C₄H, c-C₃H₂ y c-C₃H, C¹³CH, ¹³CCH, l-C₃H y l-H₂C₃ (en orden decreciente de abundancias). También se han detectado nueve líneas rotacionales del ion l-C₃H⁺, lo que ha permitido mejorar sus constantes espectroscópicas. En el Capítulo 7 se analiza la abundancia, condiciones de excitación, química y distribución espacial de los hidrocarburos detectados en la Barra de Orión.

c. Moléculas orgánicas complejas y sus precursores

Debido a los elevados flujos de radiación FUV que iluminan el borde de la Barra de Orión cabría pensar que en este ambiente tan hostil no se observarían altas abundancias de moléculas complejas, pero en el barrido espectral realizado en el frente de disociación de la Barra se han detectado más de 250 líneas de moléculas orgánicas complejas y de sus precursores: H_2CO , CH_3OH , HCO , H_2CCO , CH_3CHO , H_2CS , HCOOH , CH_3CN , CH_2NH , HNCO , H_2^{13}CO , y HC_3N (en orden decreciente de abundancias). En el Capítulo 8 se analiza en detalle la abundancia, condiciones de excitación, posibles mecanismos de formación y distribución espacial de las COMs y sus precursores detectadas en la Barra de Orión. En el Capítulo 9 se presenta la primera detección del conformero *cis*- HCOOH en el medio interestelar y su proceso de formación mediante el mecanismo de fotoconmutación.

d. Iones reactivos

Los iones reactivos son uno de los mejores trazadores de PDRs e indican la presencia de fotones UV. Estos compuestos reaccionan rápidamente con H , H_2 y electrones por

lo que es de esperar que sus abundancias sean mínimas en las regiones de las nubes moleculares más protegidas de la radiación. La abundancia de estos iones reactivos sólo es significativa en las capas más calientes e iluminadas de las PDRs o en las nubes difusas (e.g. Gerin et al. 2016), ya que se puede mantener una densidad elevada de sus especies parentales C^+ (e.g. $\text{C}^+ + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{HOC}^+ + \text{H}$) y S^+ (e.g. $\text{S}^+ + \text{OH} \rightarrow \text{SO}^+ + \text{H}$; Sternberg y Dalgarno, 1995). En el barrido espectral de la Barra de Orión se han detectado 5 iones reactivos: SH^+ , HOC^+ , SO^+ , CO^+ y CF^+ (en orden decreciente de abundancias). El Capítulo 10 recoge los resultados del análisis de la abundancia, química y distribución espacial de los iones reactivos detectados en las observaciones de IRAM-30m y ALMA.

e. Líneas de recombinación

Se han detectado un gran número de líneas de recombinación de hidrógeno (57 líneas) y helio (6 líneas) lo que indica la presencia de gas ionizado en la región HII vecina (emisión captada por el haz del telescopio a 3 mm y 2 mm). También se han detectado 19 líneas de recombinación de carbono, las cuales se originan en el frente de disociación de la Barra de Orión. Se presentan en el Capítulo 11.

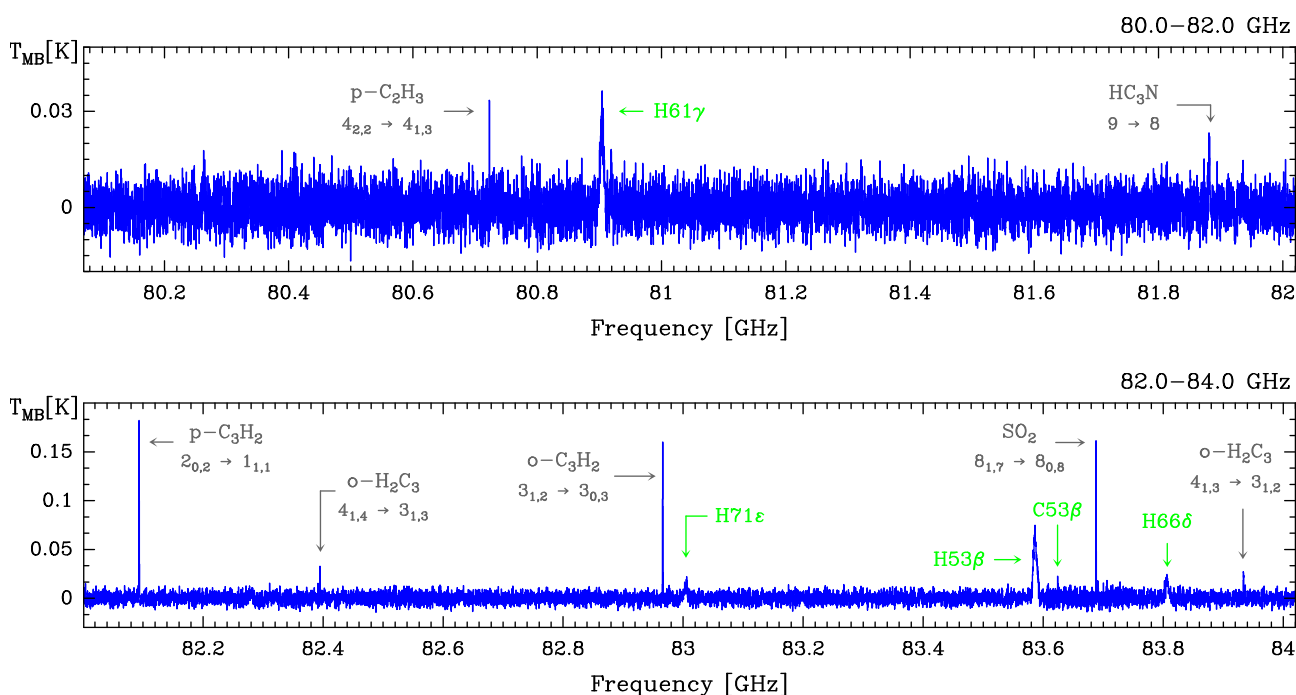


Figura 5.7: Barrido espectral completo de la Barra de Orión (espectro azul; rojo para los zooms) realizado con el radiotelescopio IRAM-30m. La resolución espectral es de 200 kHz, excepto en los intervalos marcados con una línea horizontal verde que es de 2 MHz.

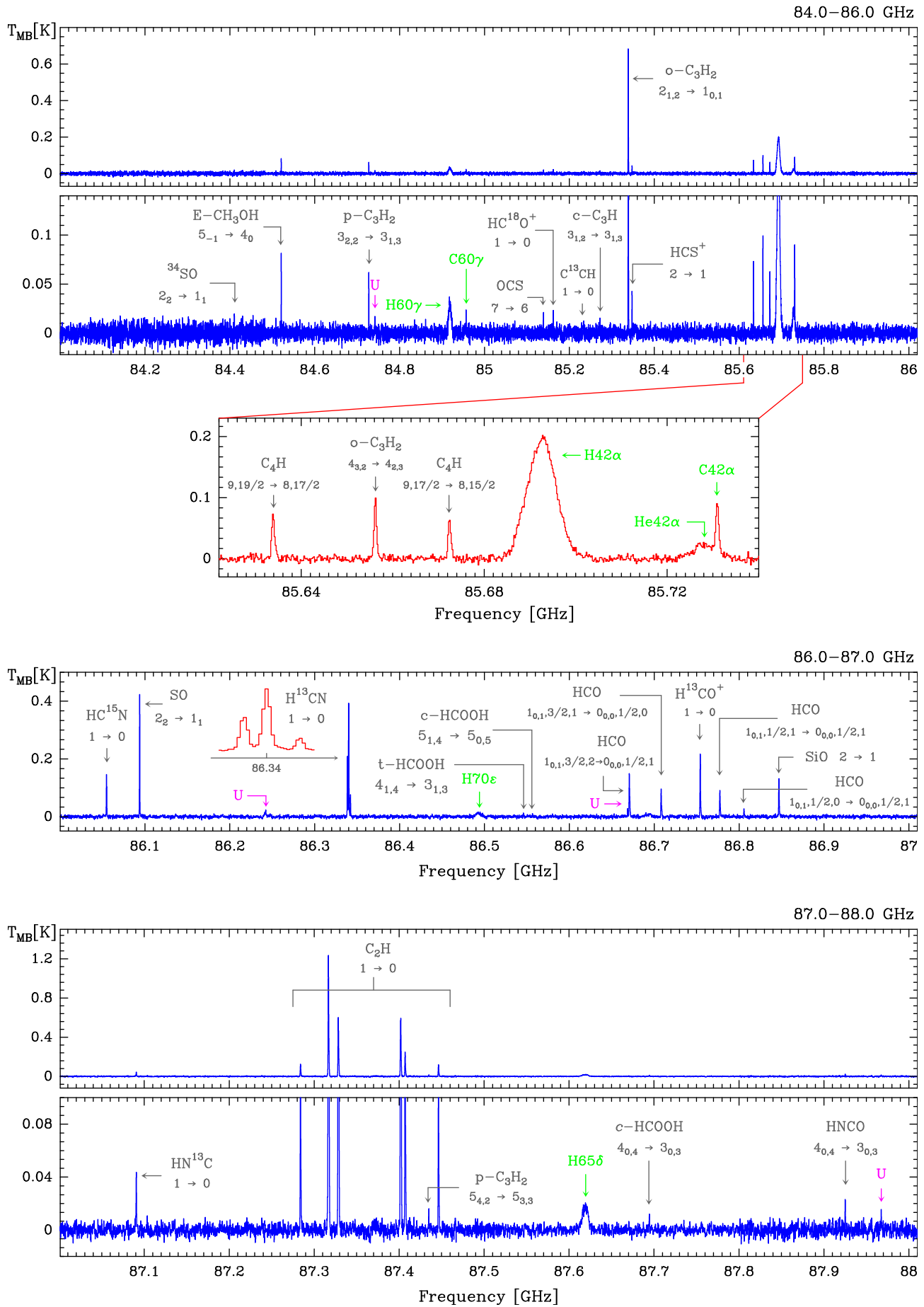


Figura 5.7: Continuación.

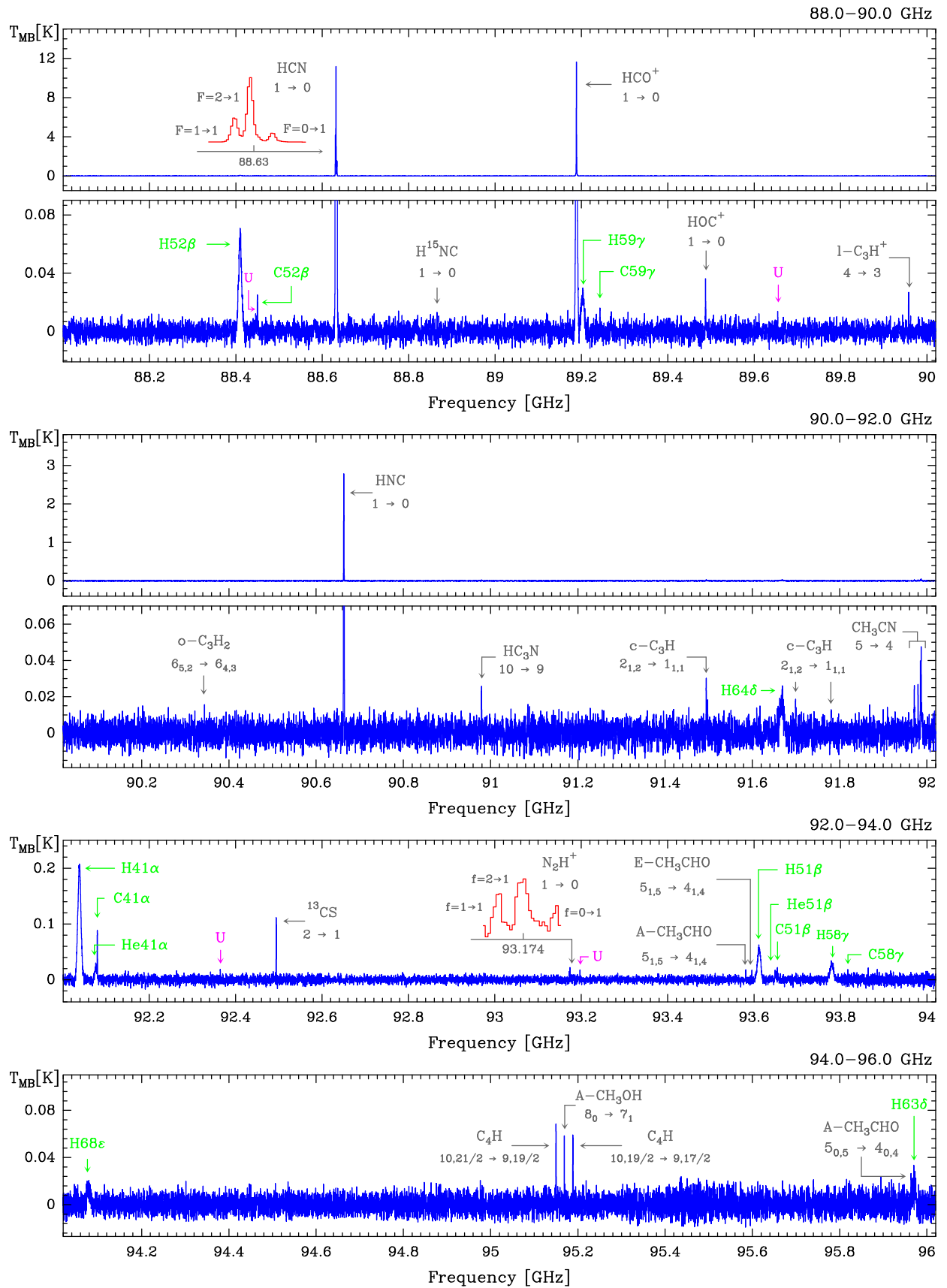


Figura 5.7: Continuación.

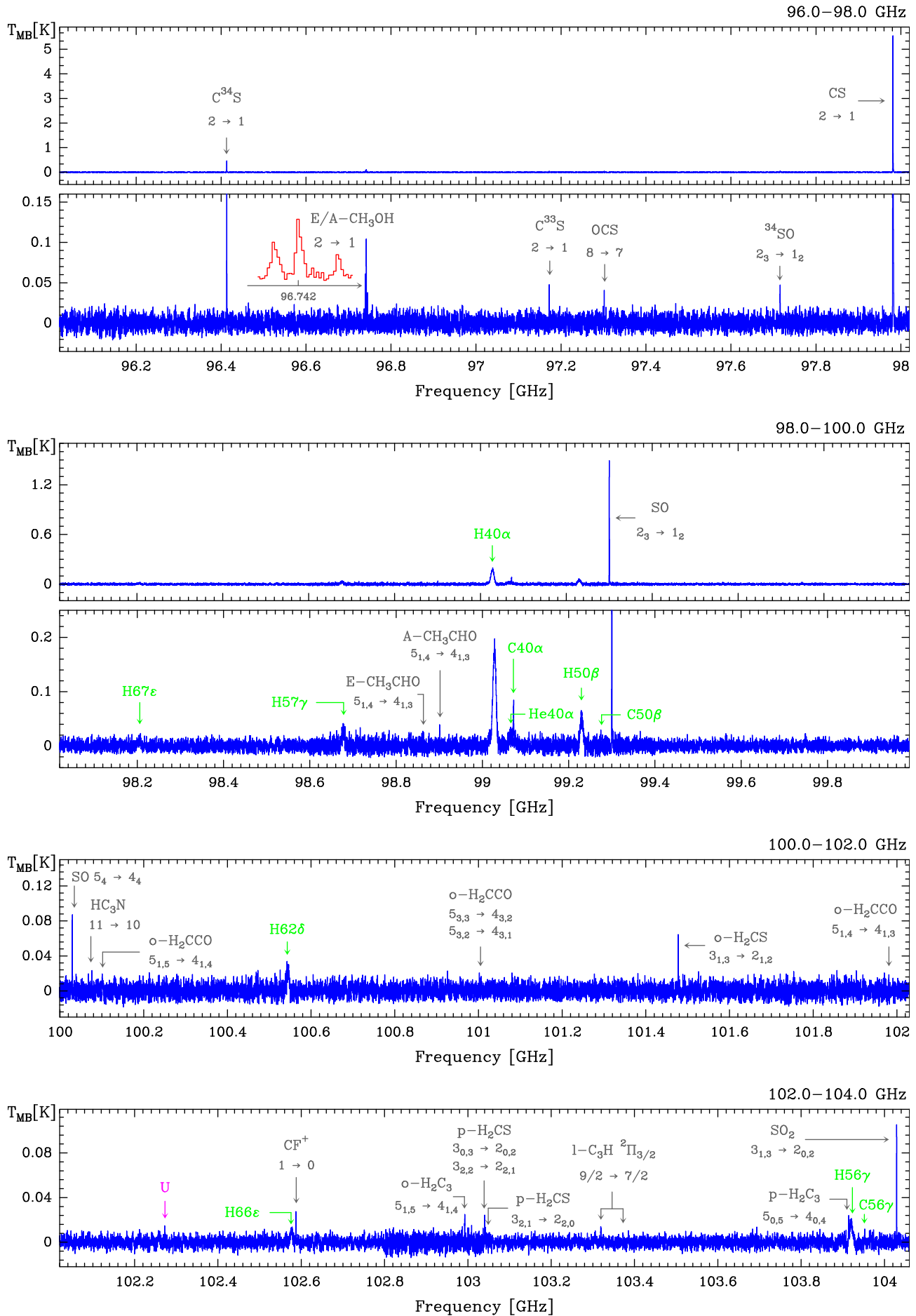


Figura 5.7: Continuación.

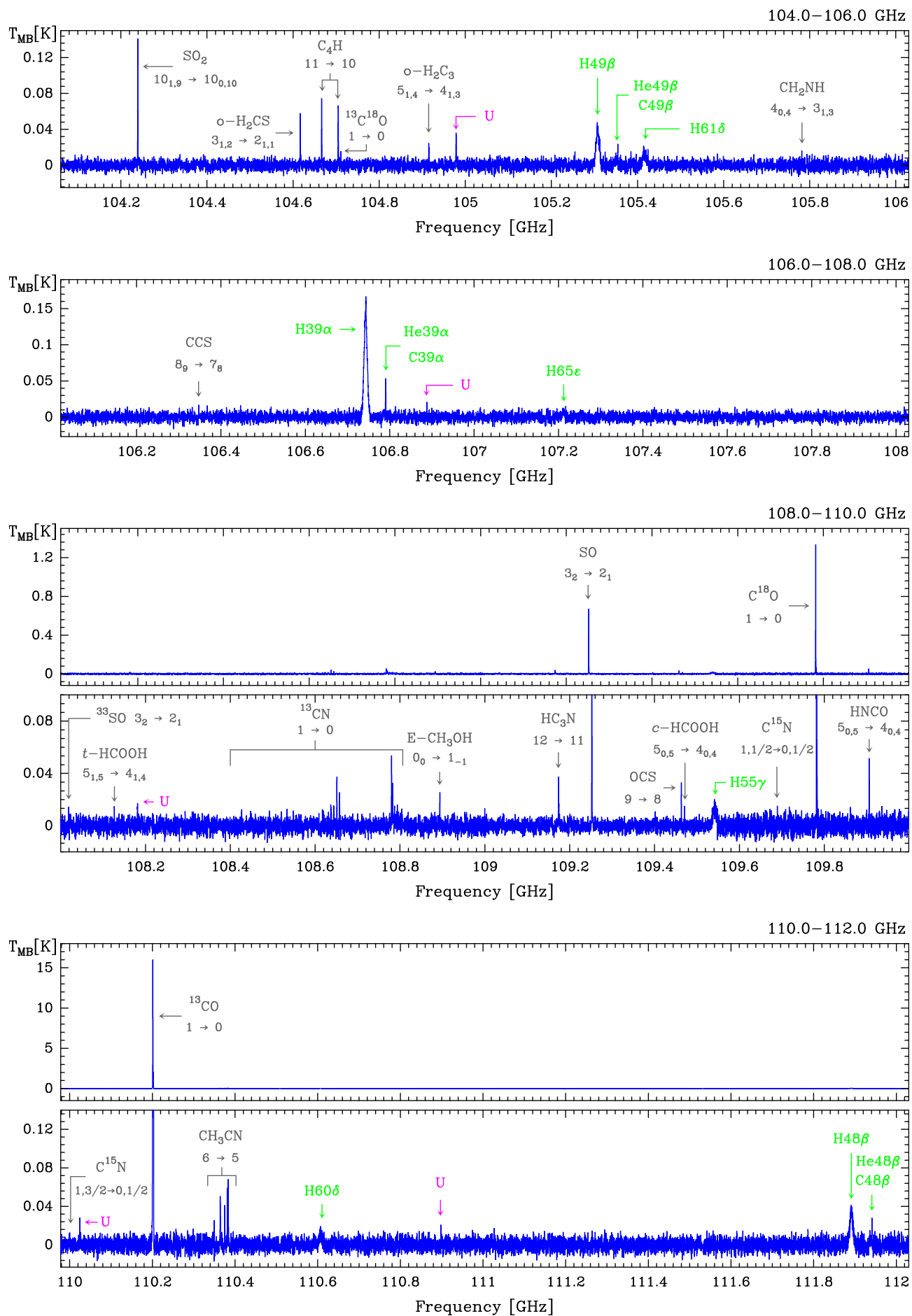


Figura 5.7: Continuación.

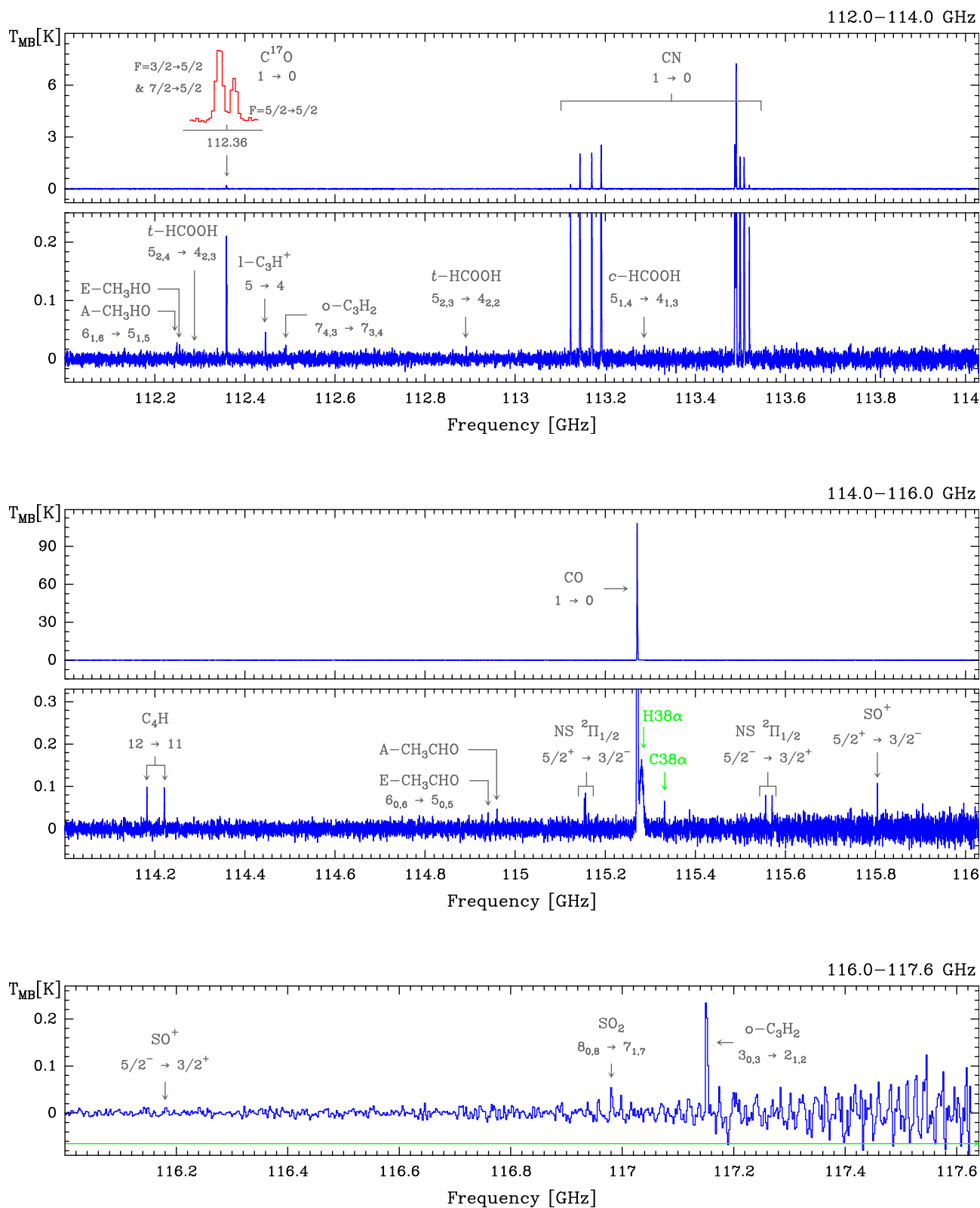


Figura 5.7: Continuación.

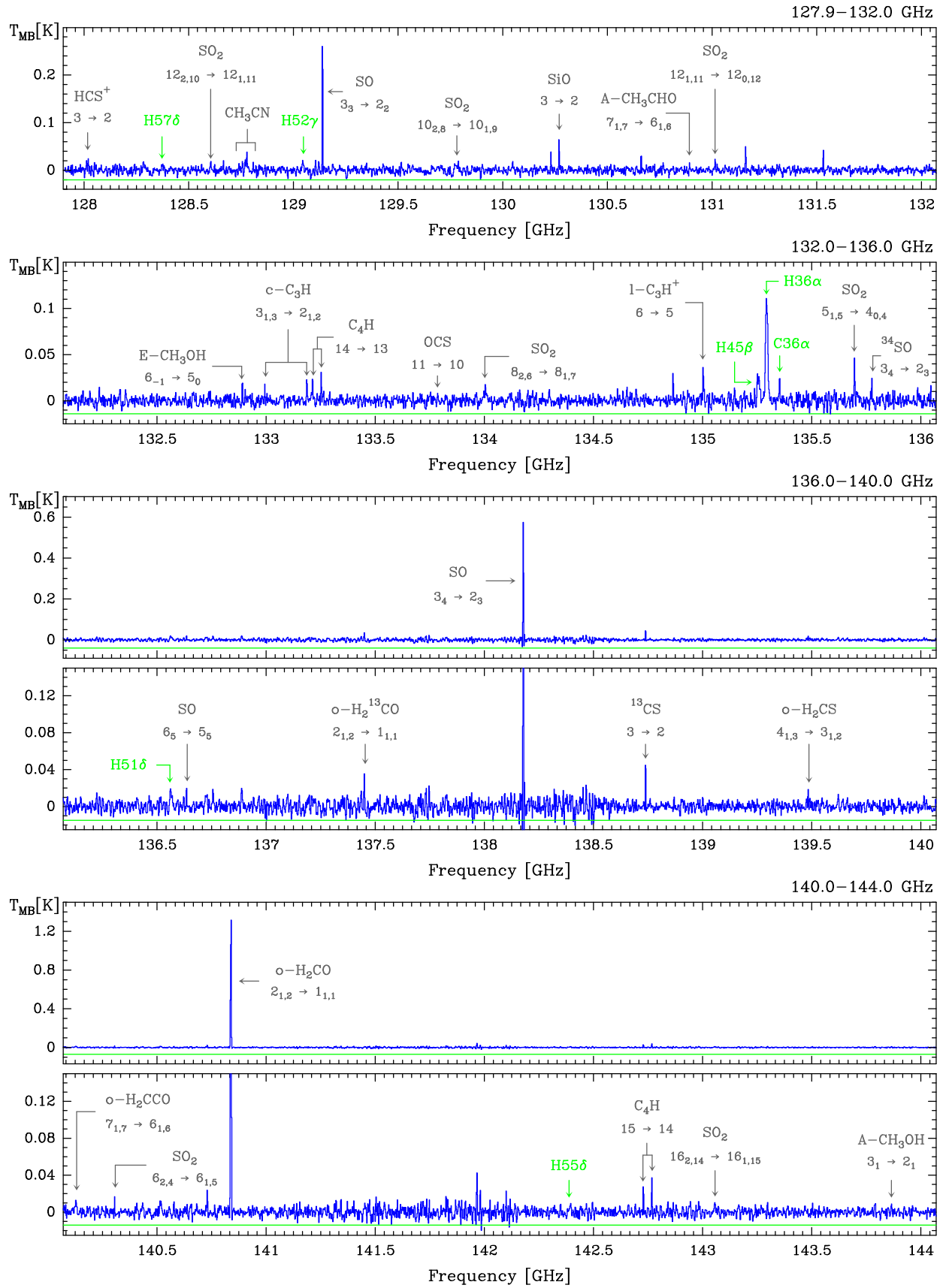


Figura 5.7: Continuación.

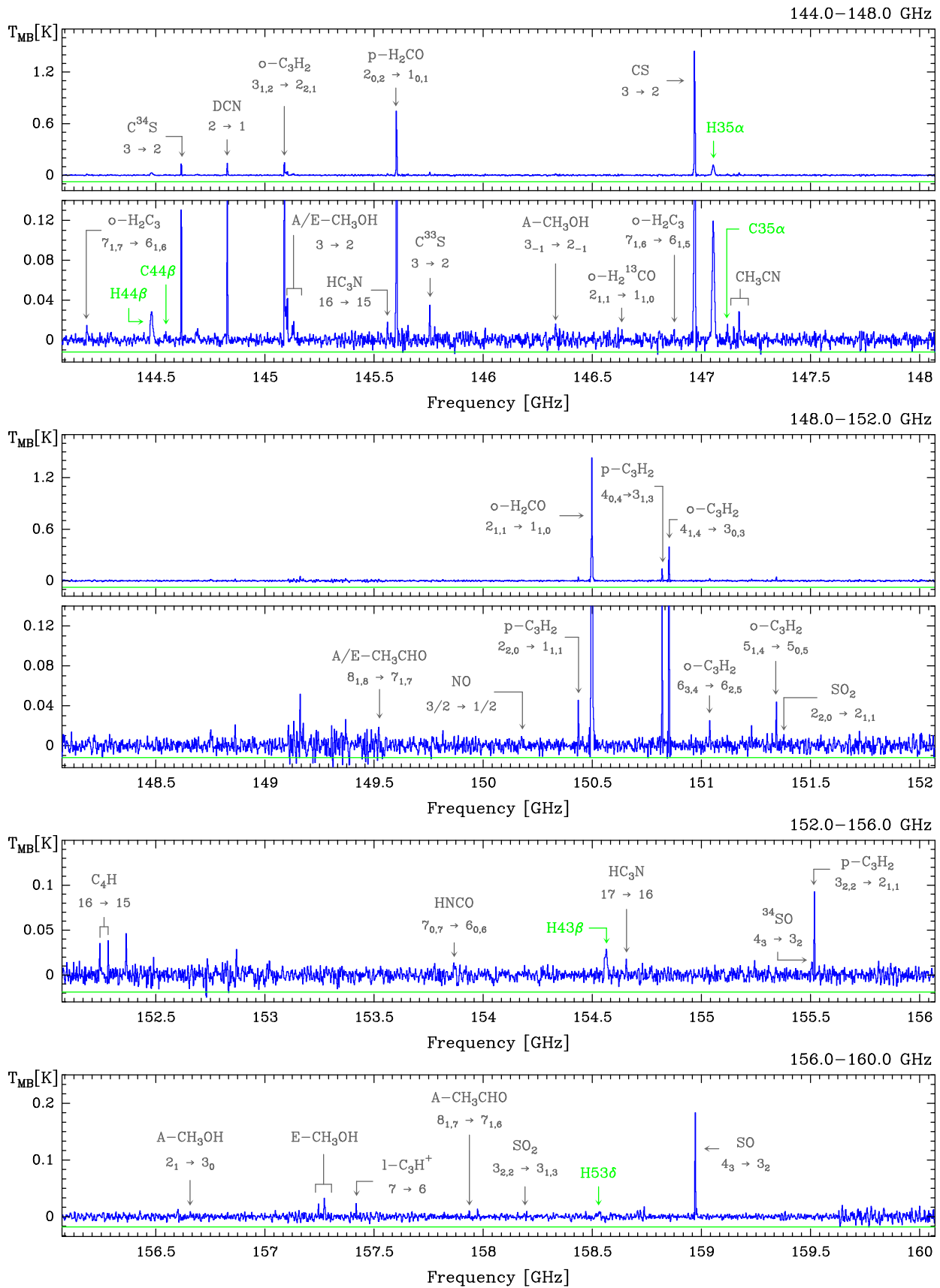


Figura 5.7: Continuación.

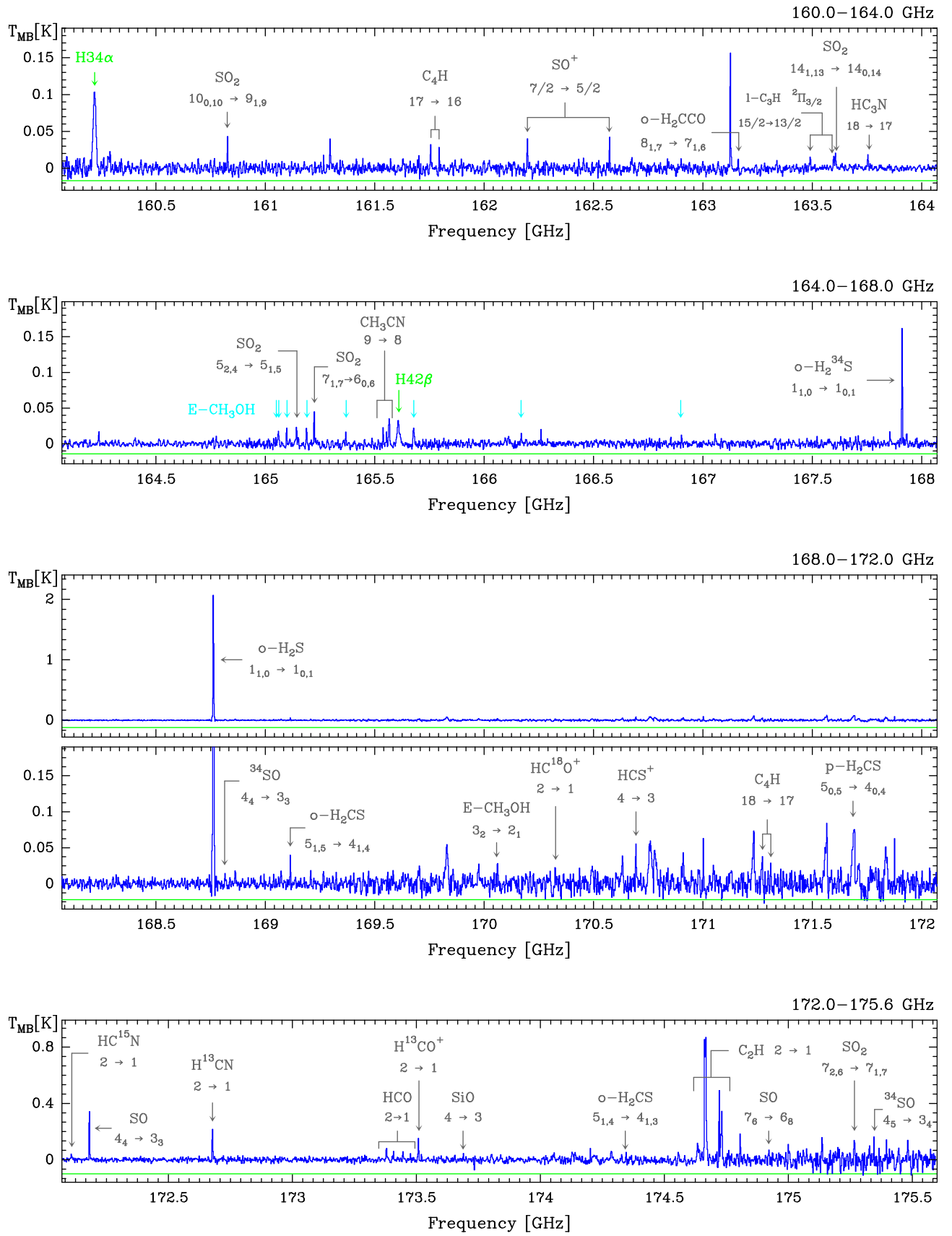


Figura 5.7: Continuación.

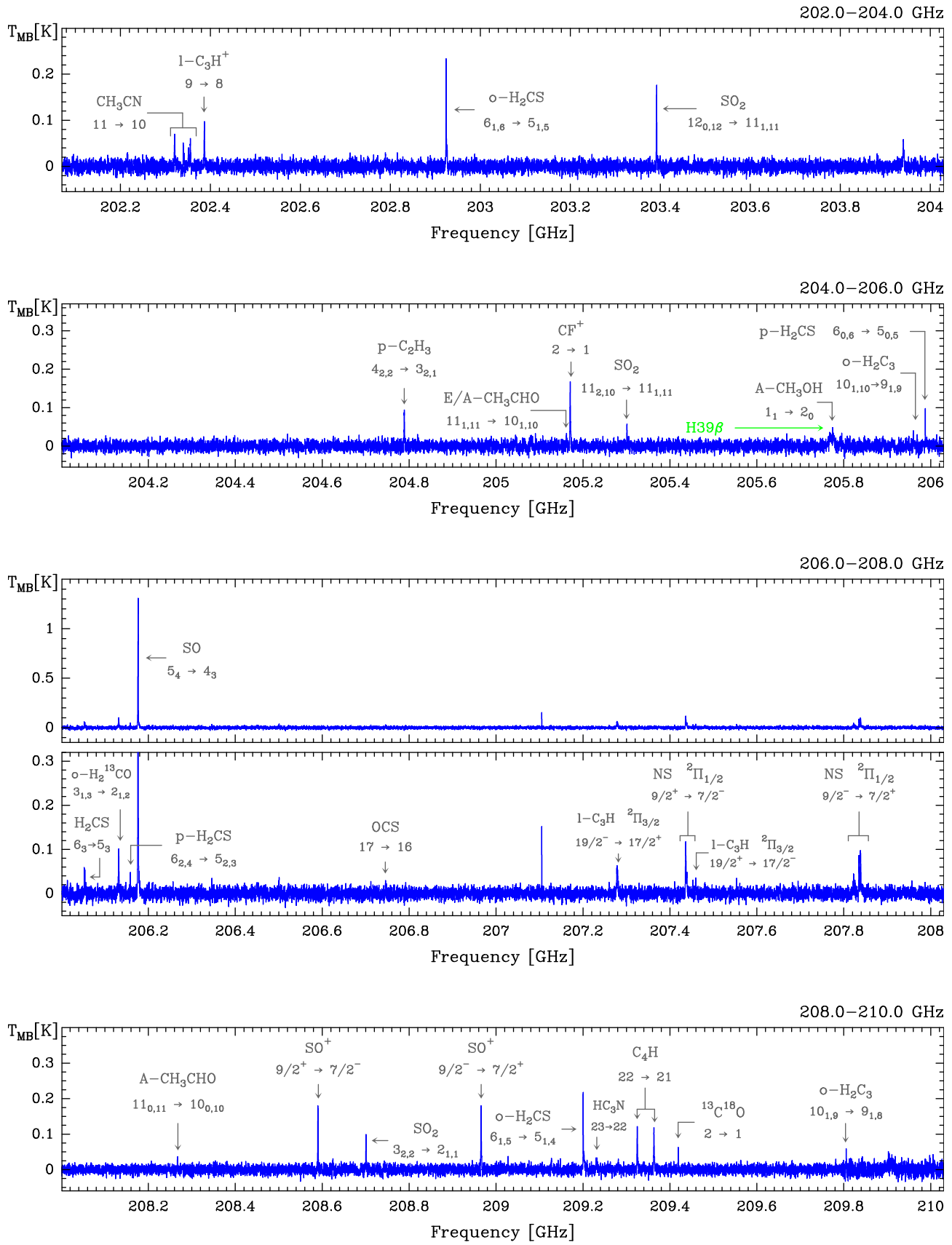


Figura 5.7: Continuación.

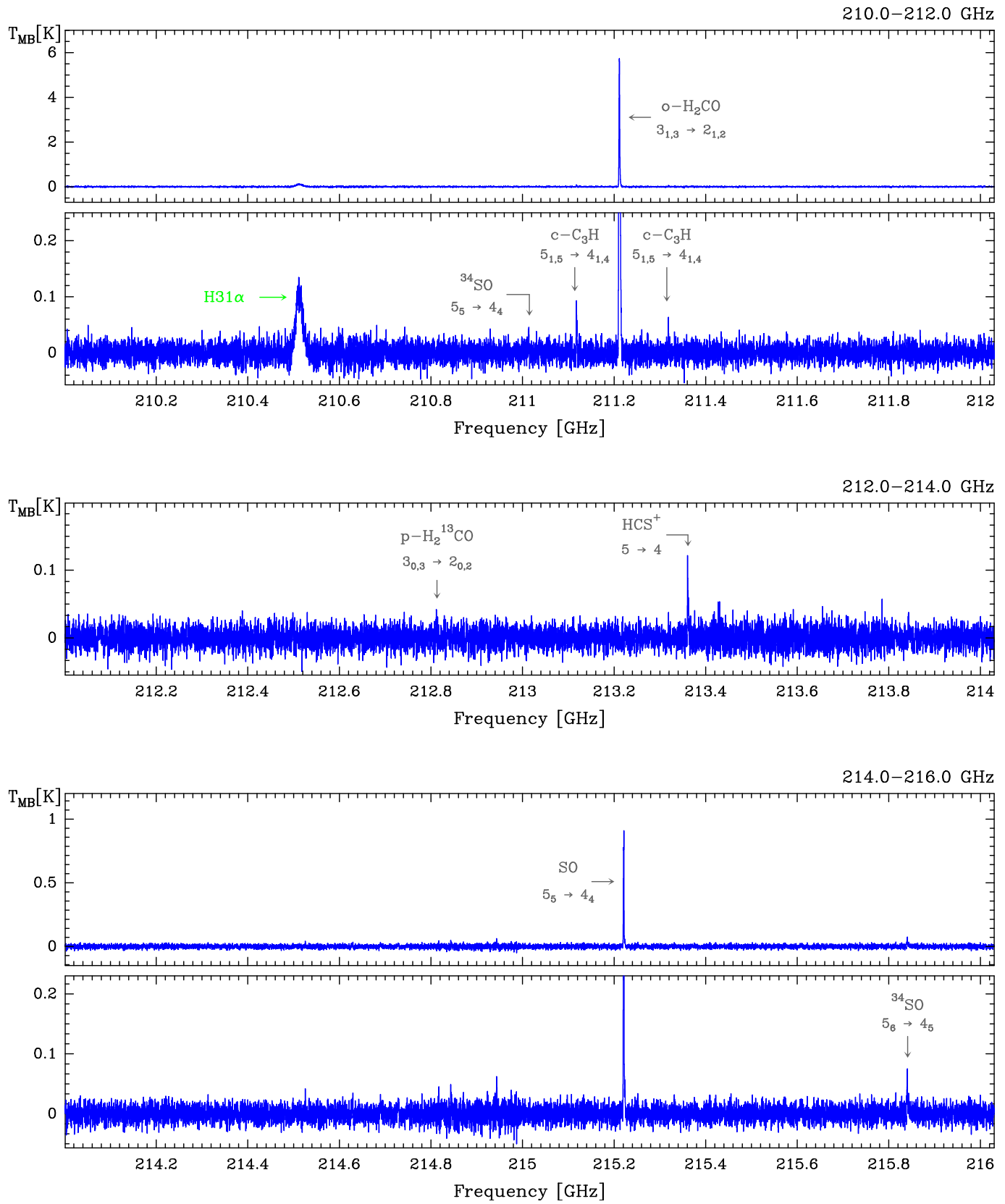


Figura 5.7: Continuación.

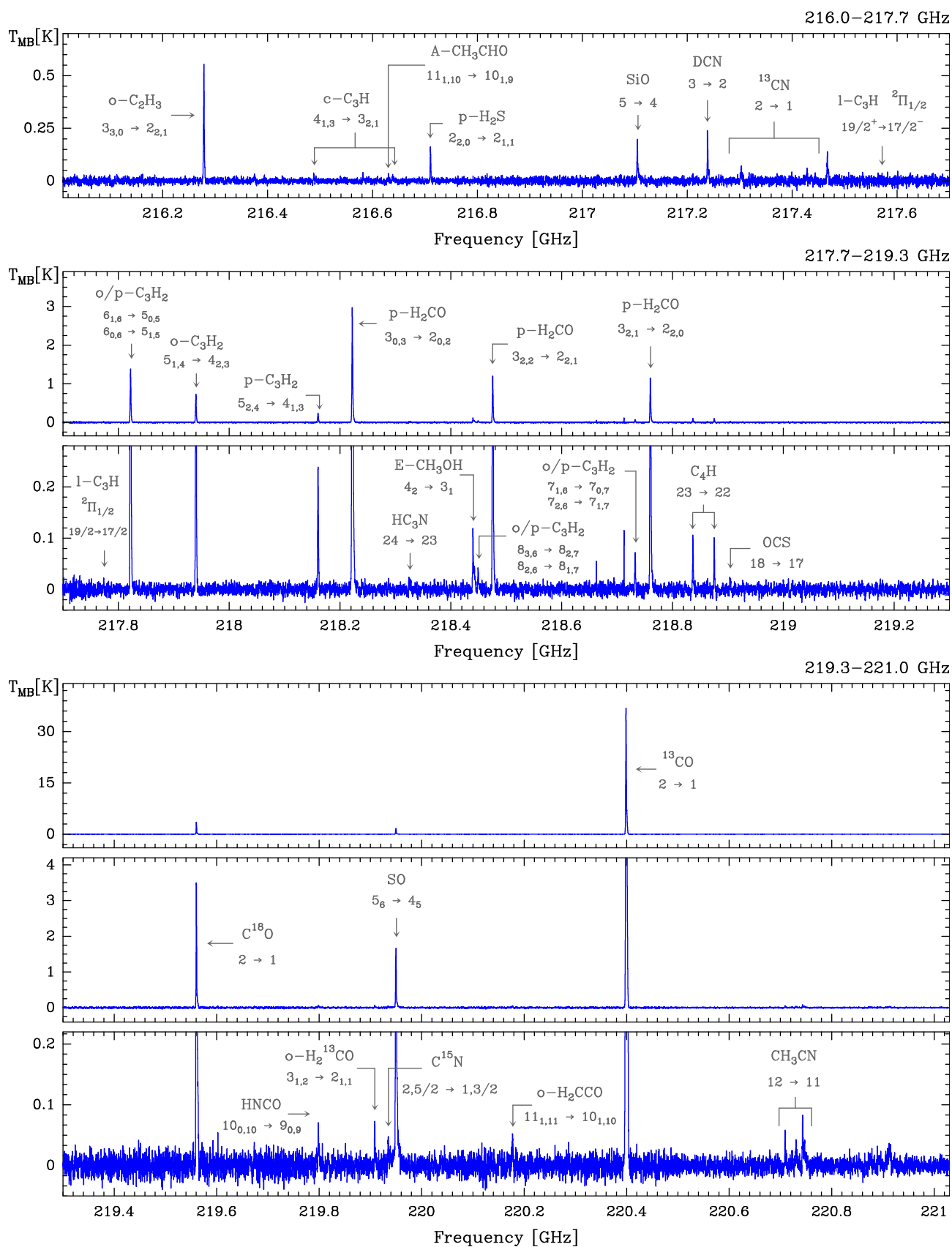


Figura 5.7: Continuación.

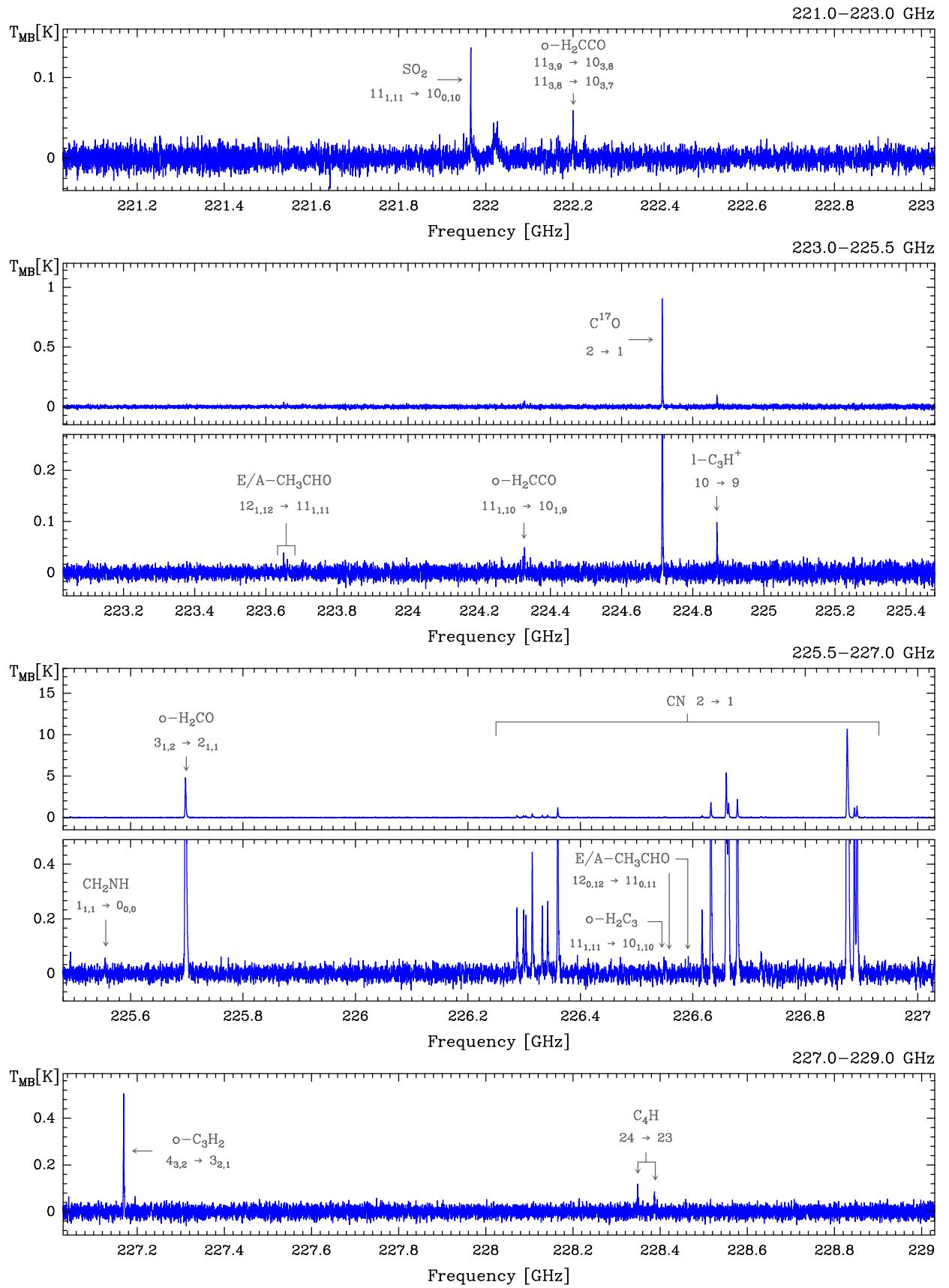


Figura 5.7: Continuación.

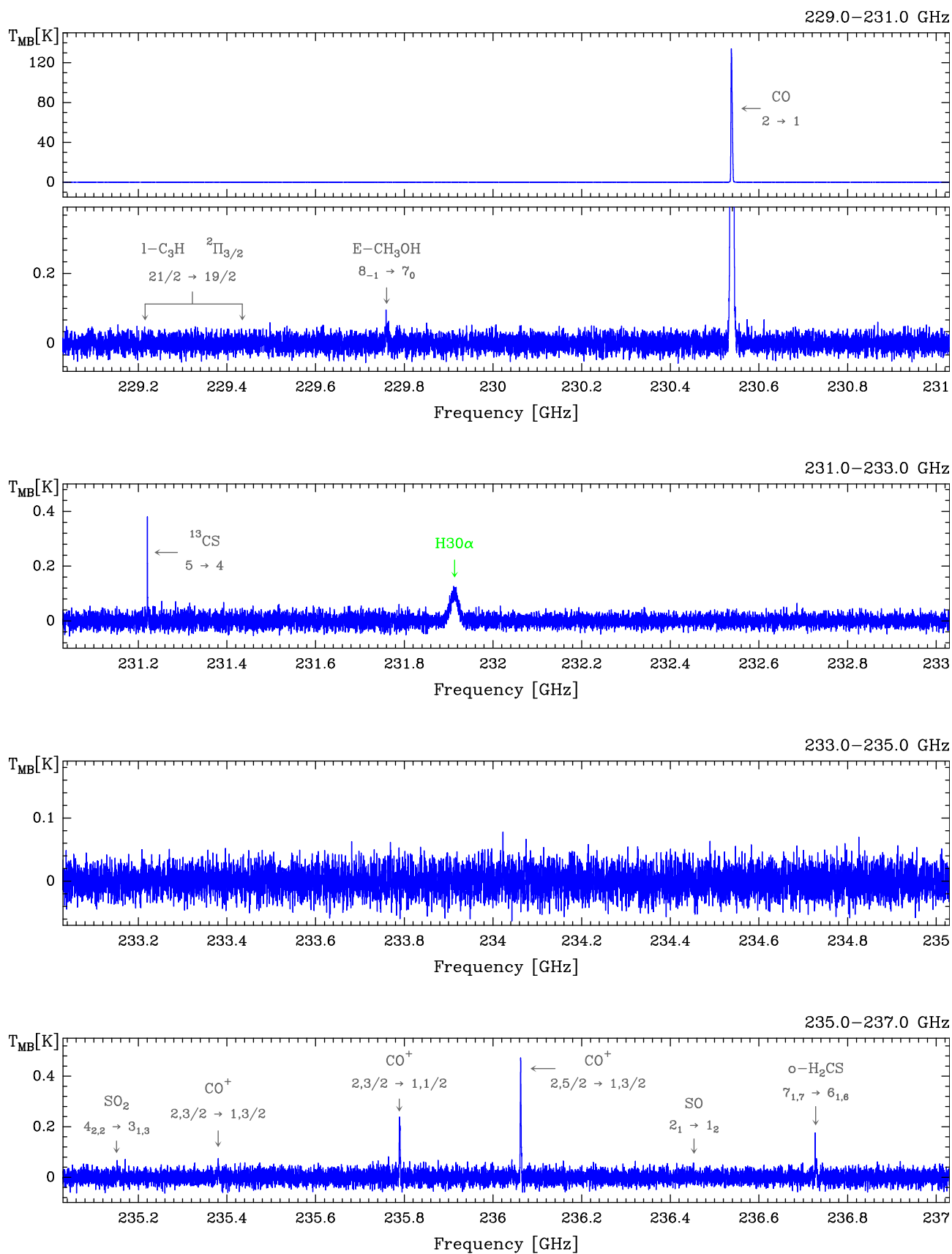


Figura 5.7: Continuación.

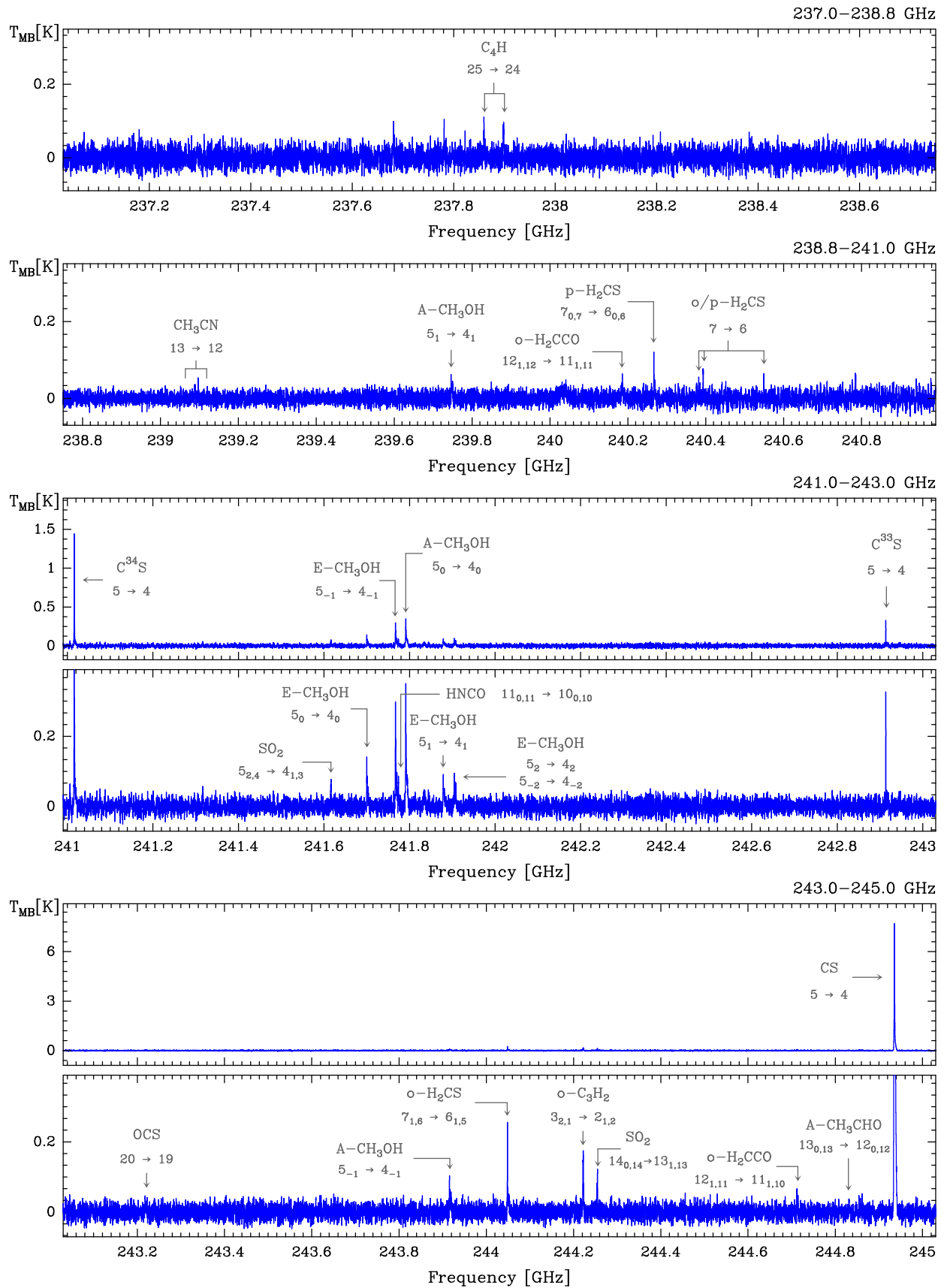


Figura 5.7: Continuación.

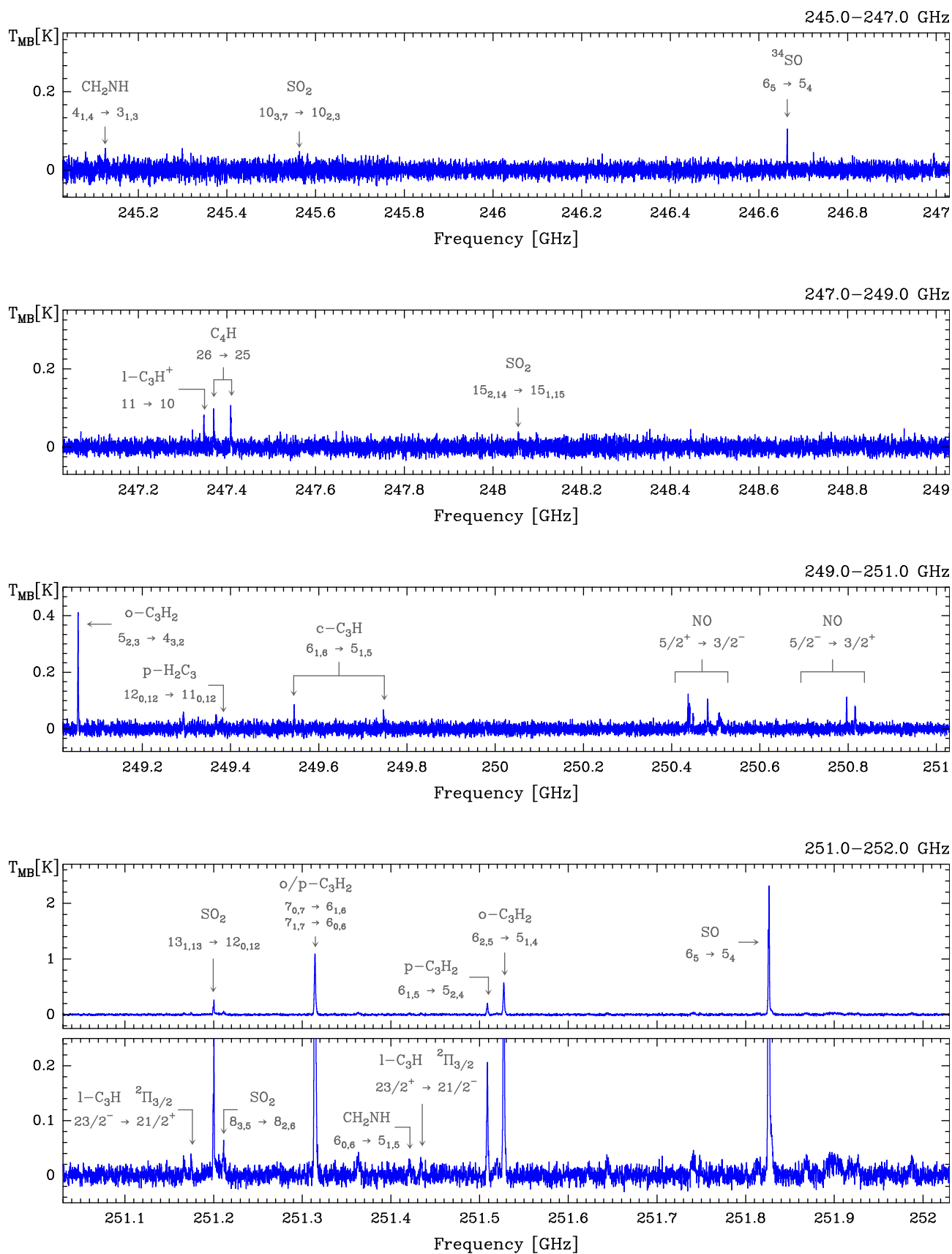


Figura 5.7: Continuación.

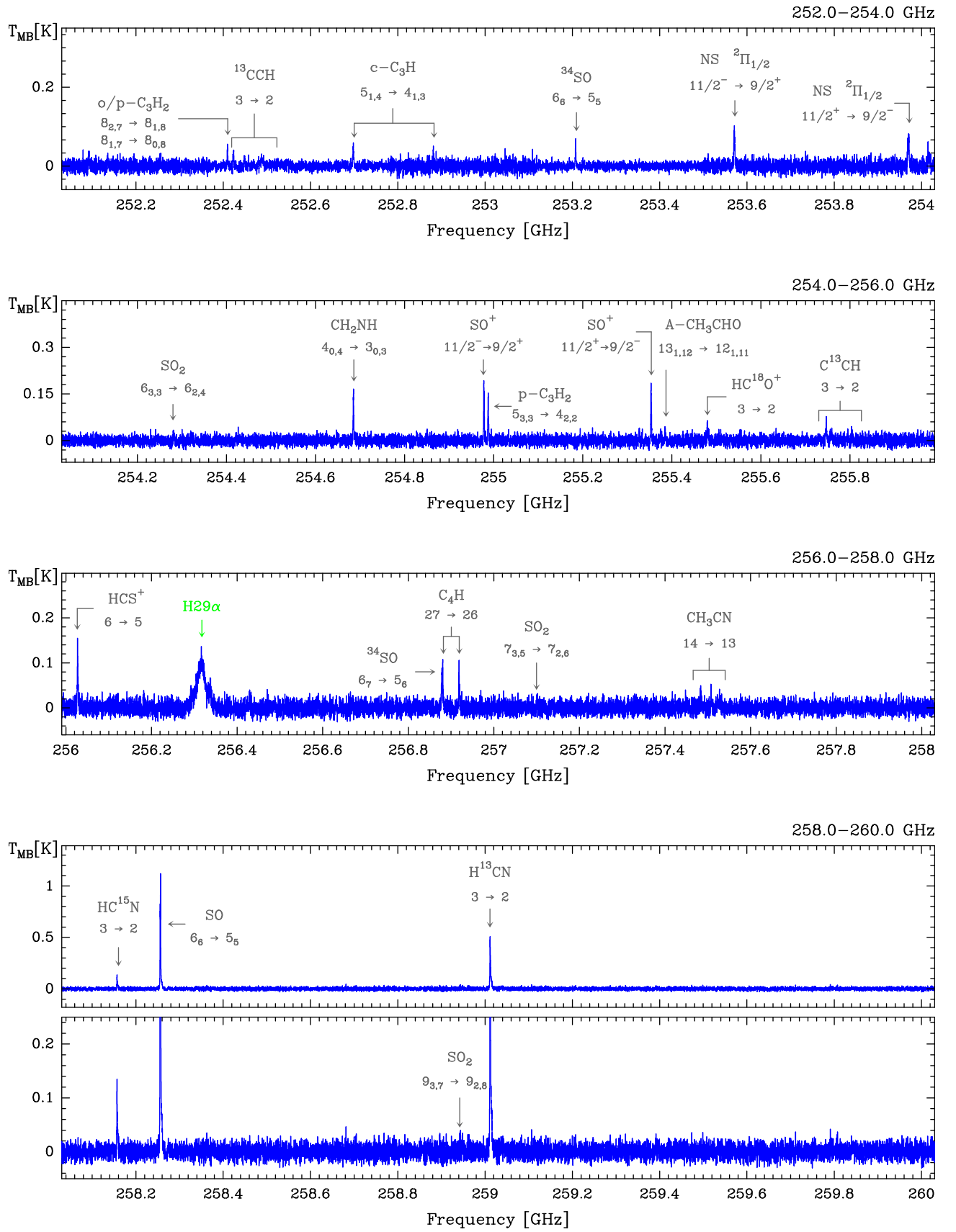


Figura 5.7: Continuación.

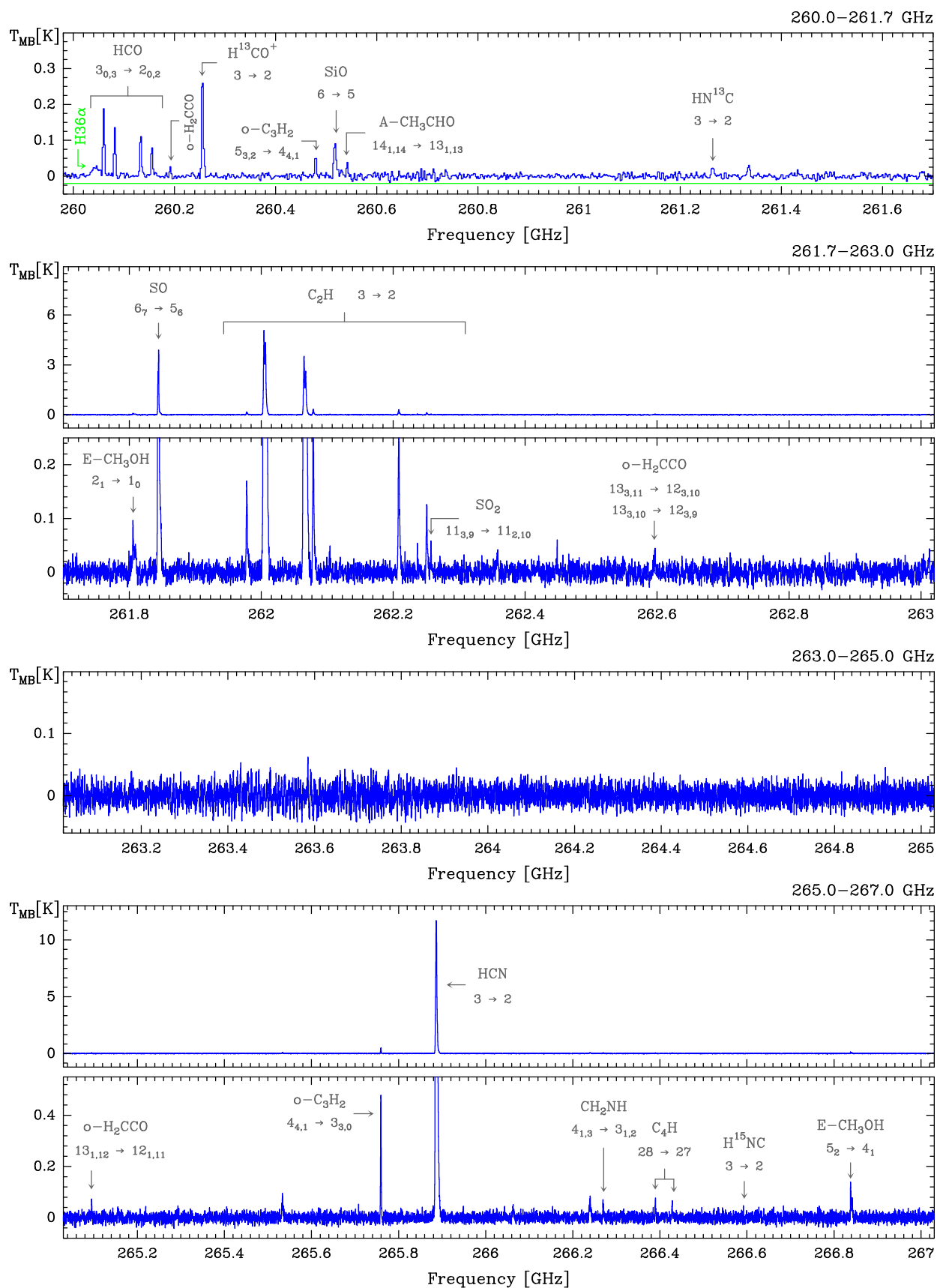


Figura 5.7: Continuación.

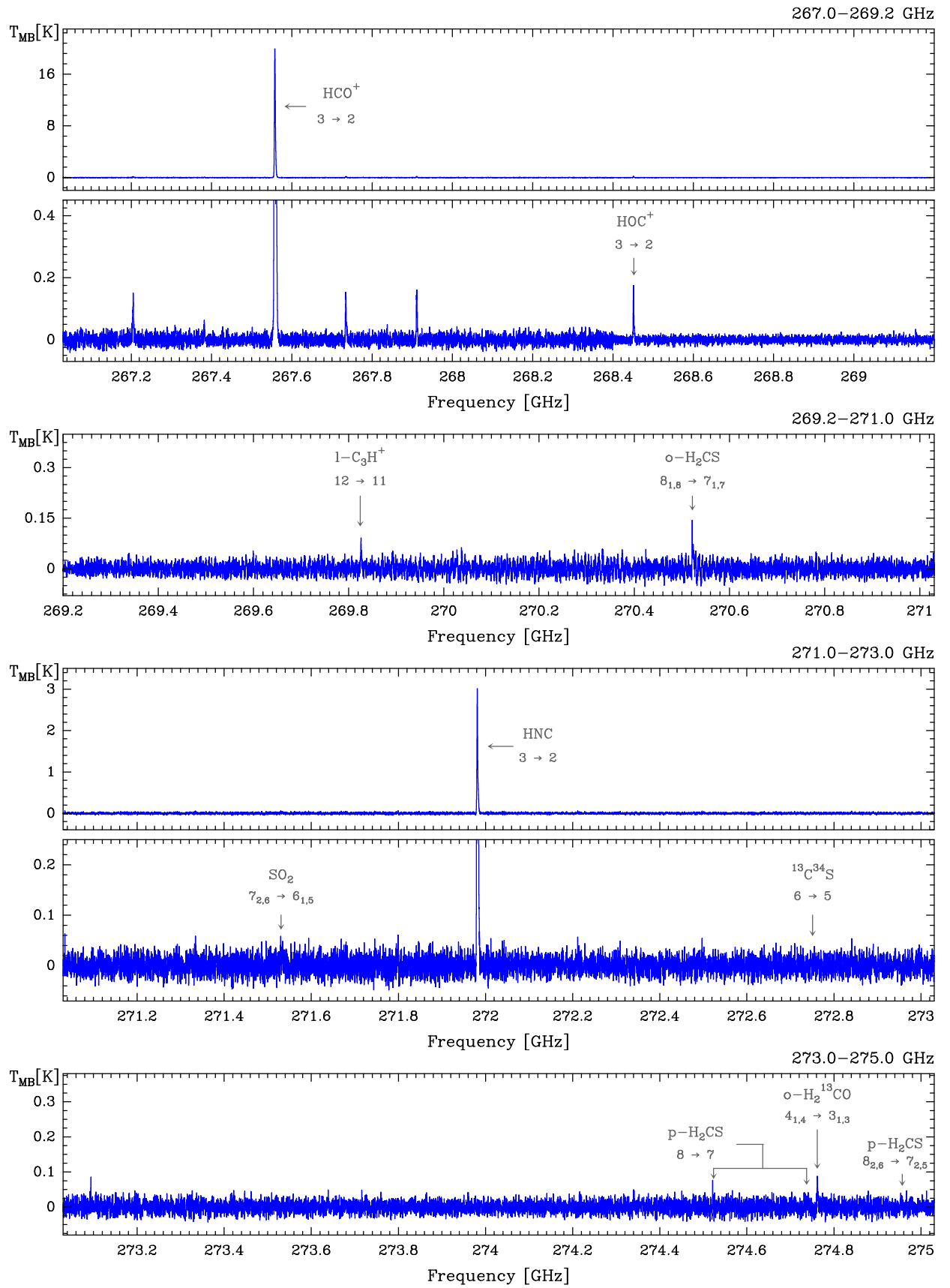


Figura 5.7: Continuación.

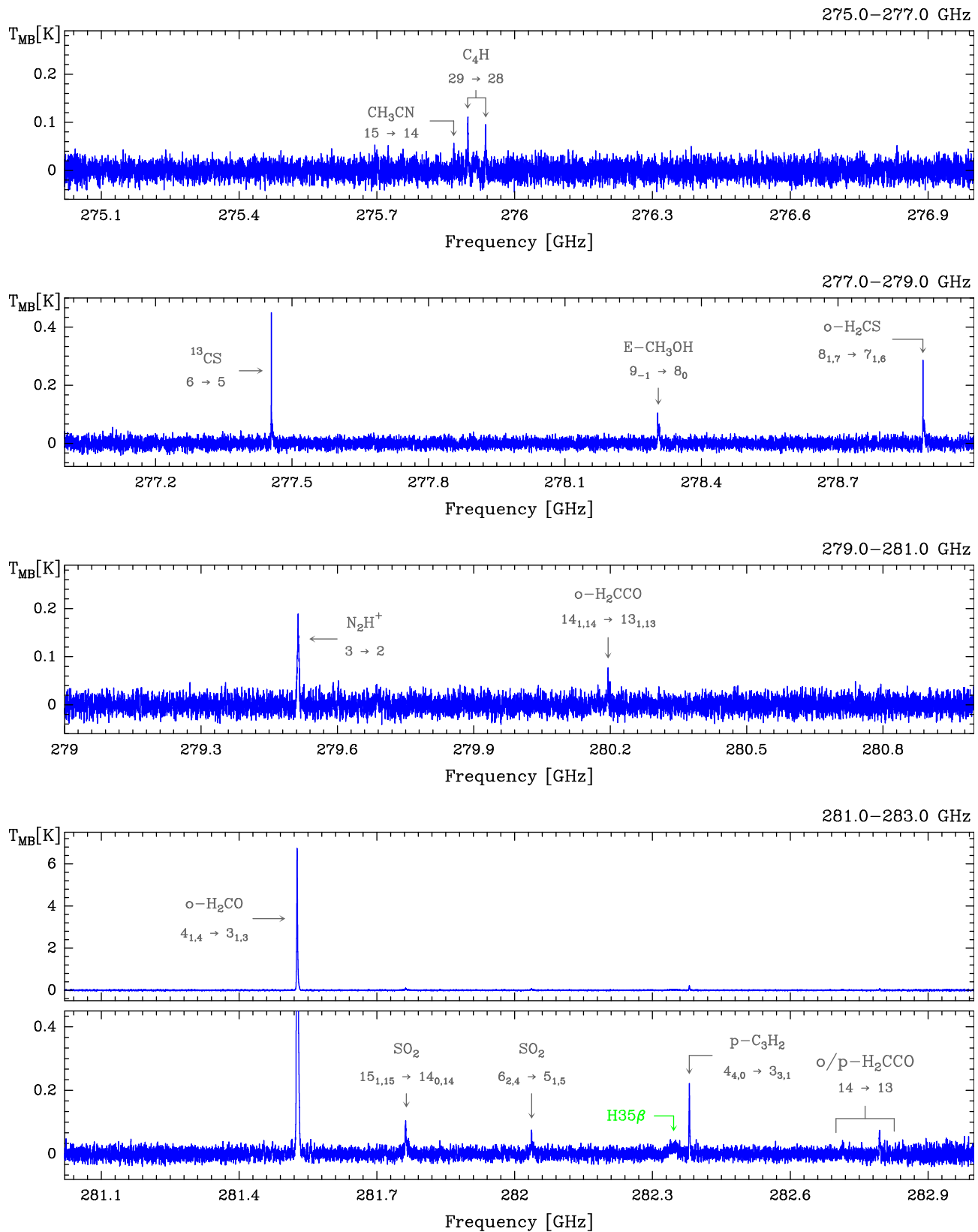


Figura 5.7: Continuación.

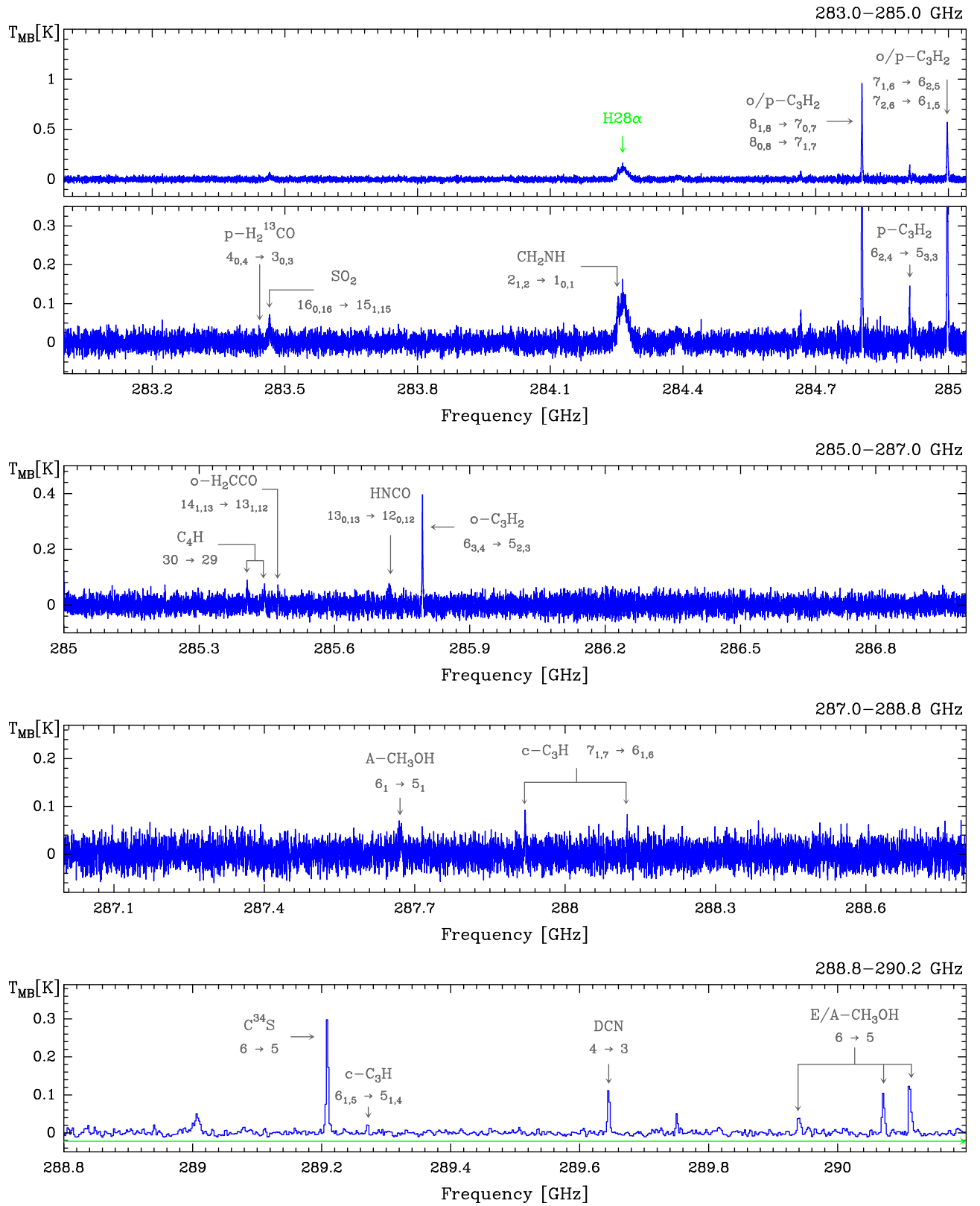


Figura 5.7: Continuación.

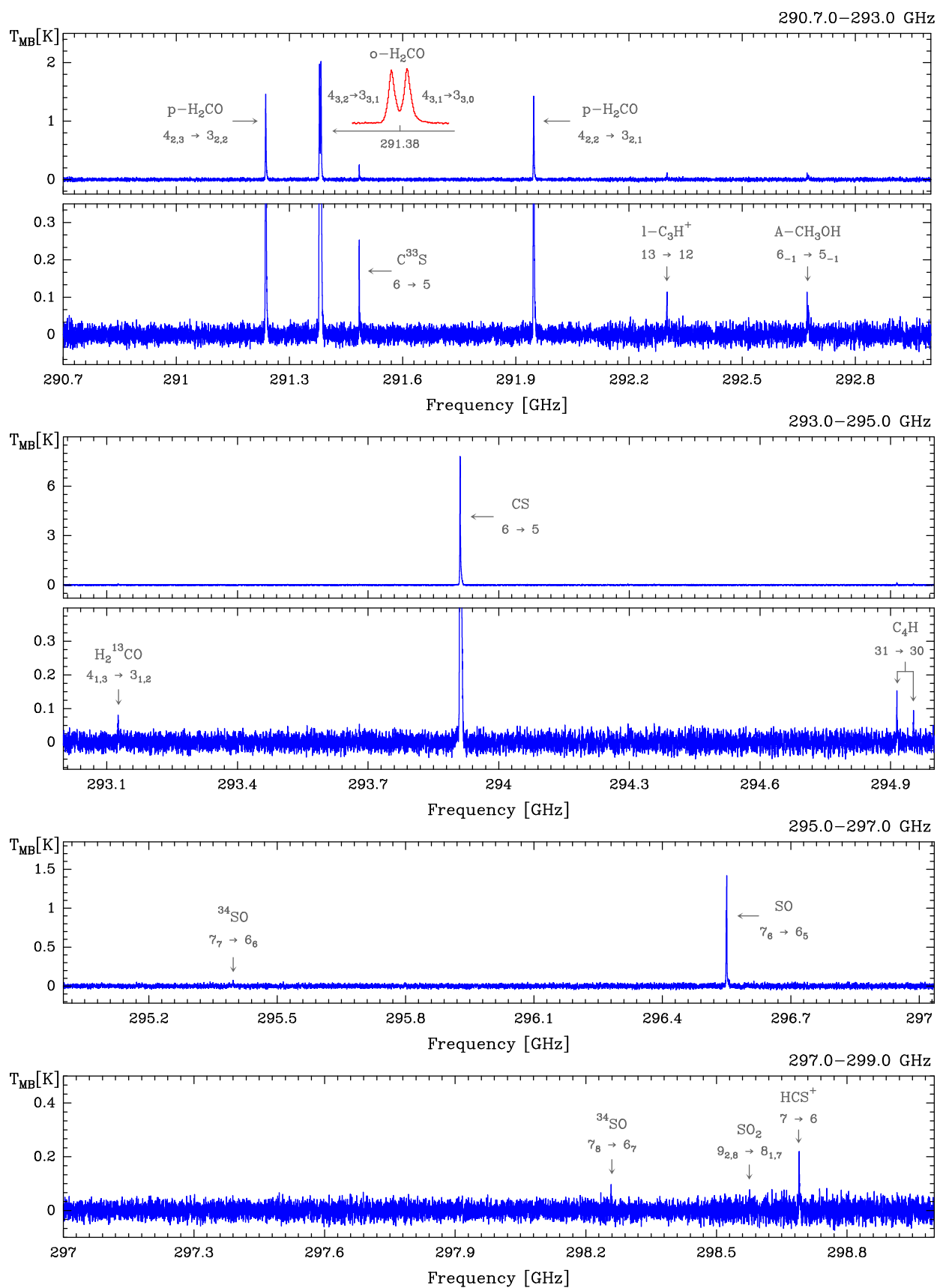


Figura 5.7: Continuación.

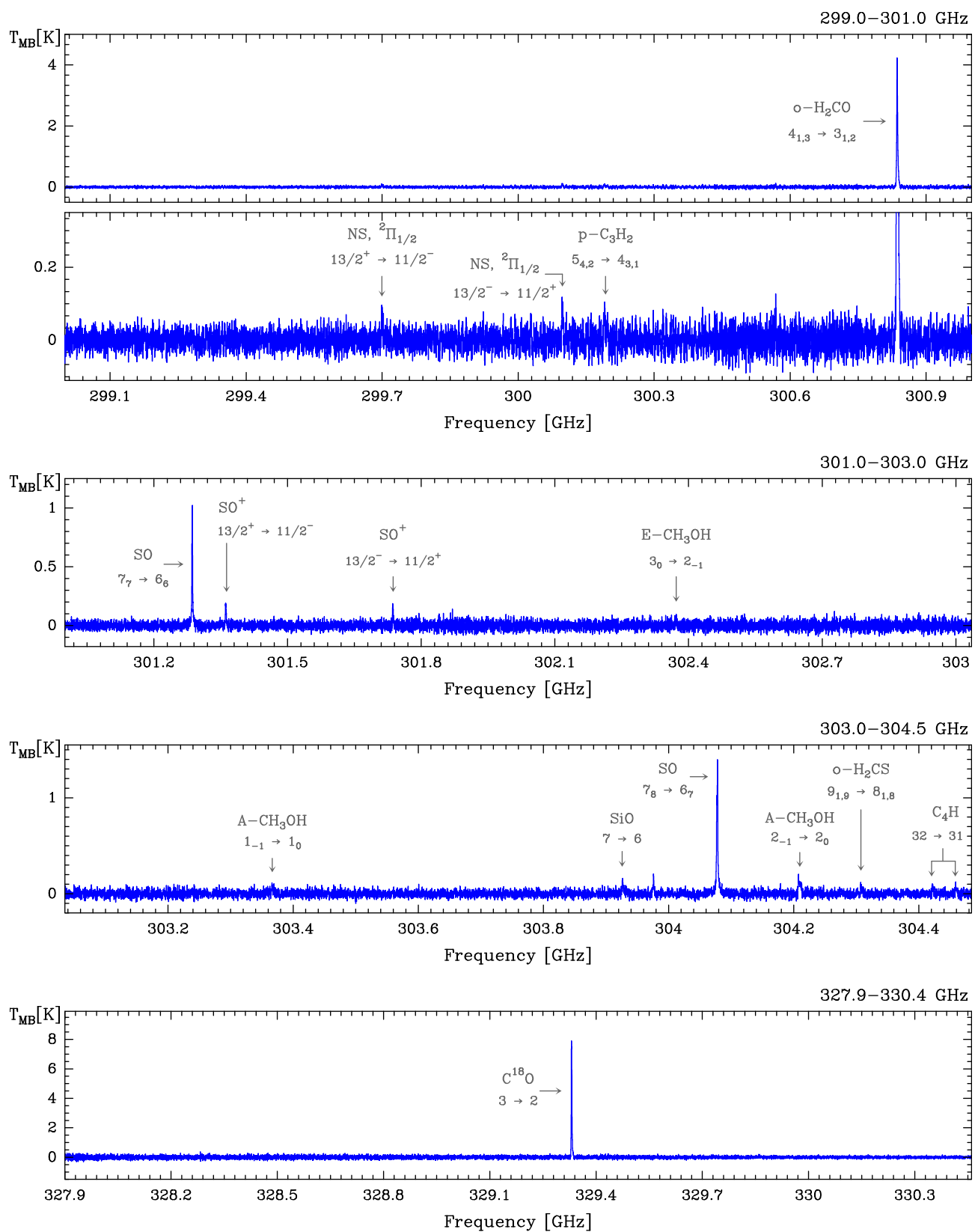


Figura 5.7: Continuación.

5.3. Cartografiado de la Barra de Orión con IRAM-30m

5.3.1. Observaciones y Reducción de datos

El estudio de la Barra de Orión se ha complementado con mapas de la emisión integrada de línea de varias especies a alta frecuencia (0.8 mm) con una resolución angular de $7''$, utilizando también el radiotelescopio IRAM-30m. Los mapas obtenidos cartografían líneas rotacionales excitadas ($J = 4 \rightarrow 3$, $3 \rightarrow 2$, ...) que trazan el gas molecular templado. Las observaciones a alta frecuencia requieren condiciones atmosféricas excelentes con <1 mm de vapor de agua precipitable y una atmósfera estable. Se utilizó el receptor E3 y el espectrómetro FFTS a 200 kHz de resolución espectral y el tiempo de integración fue de ~ 6 h. Los mapas cubren una región de la Barra de Orión de $170'' \times 170''$, centrado a $\alpha_{2000} = 05^h 35^m 20.1^s$, $\delta_{2000} = -05^\circ 25' 07.0''$, posición ligeramente desplazada de donde se llevaron a cabo las observaciones del barrido espectral, y con una posición OFF a $(-600'', 0'')$ relativa al centro del mapa.

El proceso de reducción de datos consistió en la subtracción de la línea de base de cada espectro observado. Los espectros resultantes se *resamplearon* a un cubo de datos mediante la convolución con un *kernel* gaussiano, obteniendo una resolución final de $9''$. El ruido rms alcanzado fue ~ 1 K por cada canal de ~ 0.2 km s $^{-1}$.

En la Fig. 5.8 se muestran los mapas del área integrada de línea (K km s $^{-1}$) de las moléculas CO $3 \rightarrow 2$, ^{13}CO $3 \rightarrow 2$, HCO^+ $4 \rightarrow 3$, H_2CO $5_{1,5} \rightarrow 4_{1,4}$,

HCN $3 \rightarrow 2$, HCN $4 \rightarrow 3$, C_2H $4 \rightarrow 3$ y SO $8_9 \rightarrow 7_8$. El mapa de C^{18}O $3 \rightarrow 2$ se muestra en la Fig. 5.1. En escala de colores se muestra la emisión en intensidad integrada de las líneas. Los contornos en negro muestran la emisión del hidrógeno molecular vibracionalmente excitado (Walmsley et al. 2000), $\text{H}_2^* v = 1 \rightarrow 0 S(1)$, el cual delinea el frente de disociación (DF, *Dissociation Front*). Los contornos en rojo muestran la emisión fluorescente de la línea de OI a $1.32 \mu\text{m}$ (Walmsley et al. 2000), y marca la posición del frente de ionización (IF, *Ionisation Front*) que separa la región HII y la nube neutra. Los contornos azules muestran la posición de los *clumps* más densos observados en H^{13}CN $J = 1 \rightarrow 0$ por Lis & Schilke (2003). Se muestra el tamaño del haz de IRAM-30m a 1 mm en la esquina inferior izquierda y la posición donde se ha llevado a cabo el barrido espectral (círculo azul sobre el frente de disociación).

En la Fig. 5.9 se muestran los mapas por canales de velocidad de las especies observadas. La emisión de la Barra de Orión se puede distinguir de la nube extensa OMC-1 por la velocidad LSR de la emisión. Mientras que OMC-1 es más brillante en el rango de velocidades $v_{\text{LSR}} \simeq 8 - 10$ km s $^{-1}$, la Barra de Orión emite predominantemente en el rango de $v_{\text{LSR}} \simeq 10 - 12$ km s $^{-1}$. Los mapas de emisión integrada de línea (Fig. 5.8) muestran todo el perfil integrado, de 0 a 20 km s $^{-1}$.

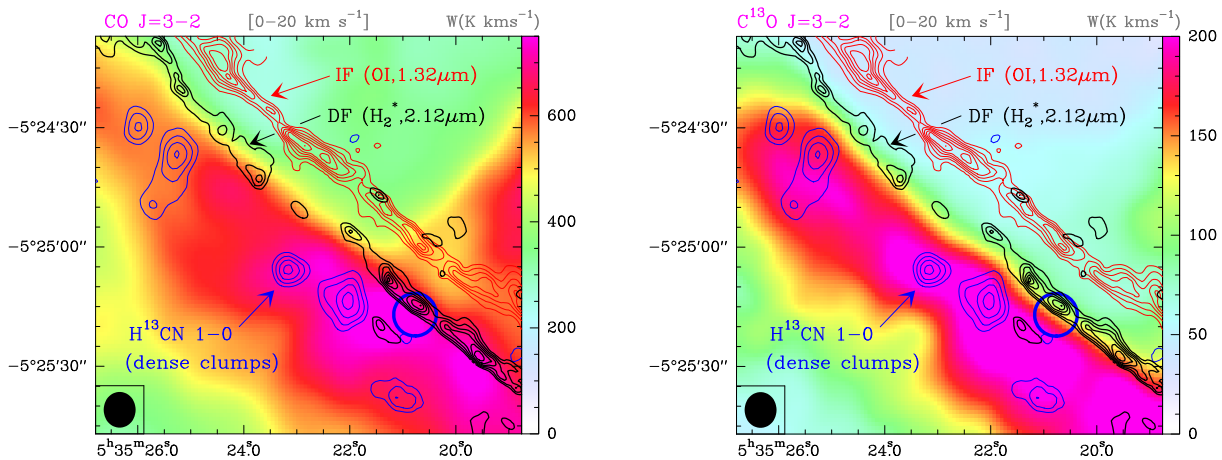


Figura 5.8: Mapas del área integrada de línea (K km s $^{-1}$) de las moléculas CO $3 \rightarrow 2$, ^{13}CO $3 \rightarrow 2$, HCO^+ $4 \rightarrow 3$, H_2CO $5_{1,5} \rightarrow 4_{1,4}$, HCN $3 \rightarrow 2$, HCN $4 \rightarrow 3$, C_2H $4 \rightarrow 3$ y SO $8_9 \rightarrow 7_8$.

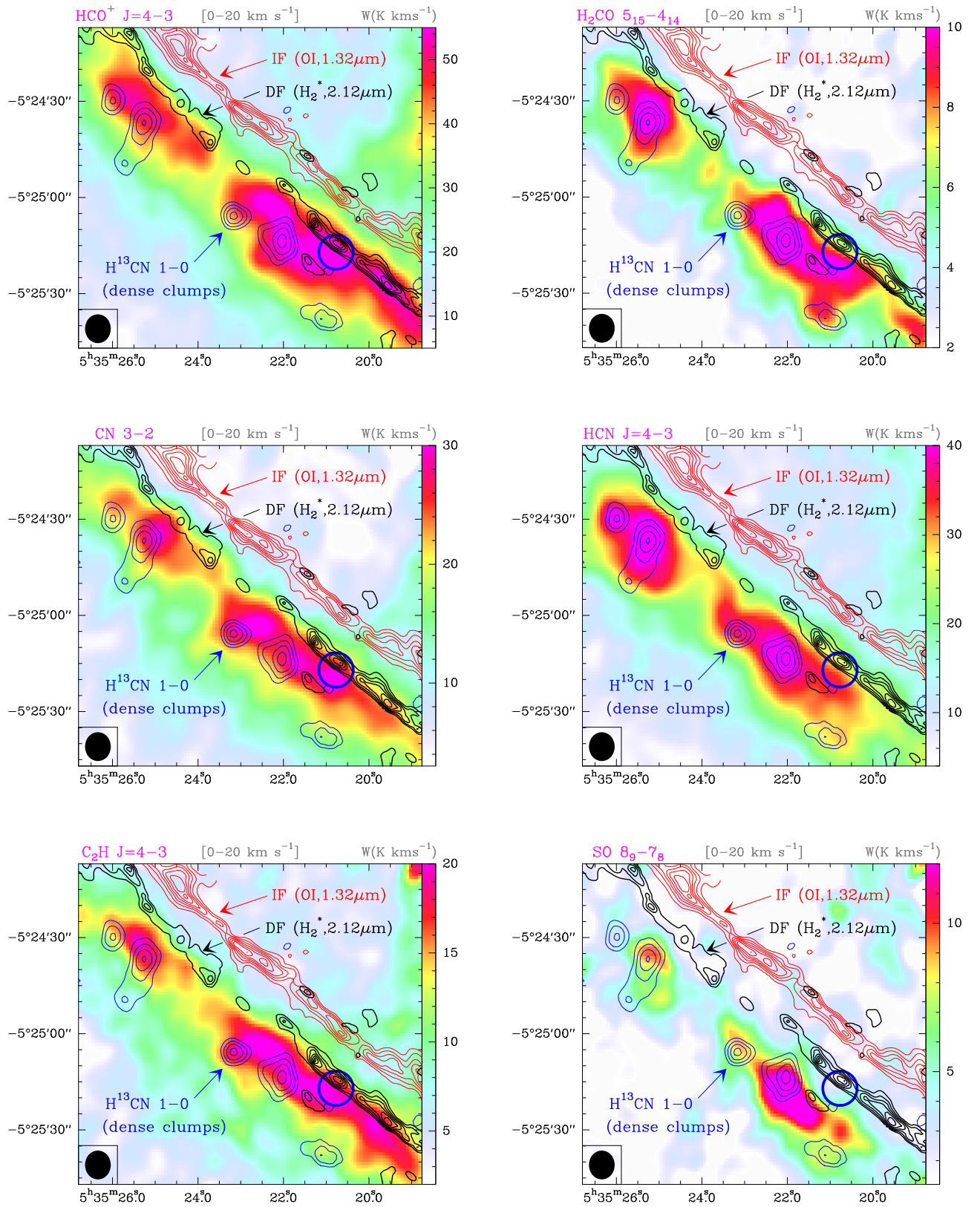


Figura 5.8: Continuación.

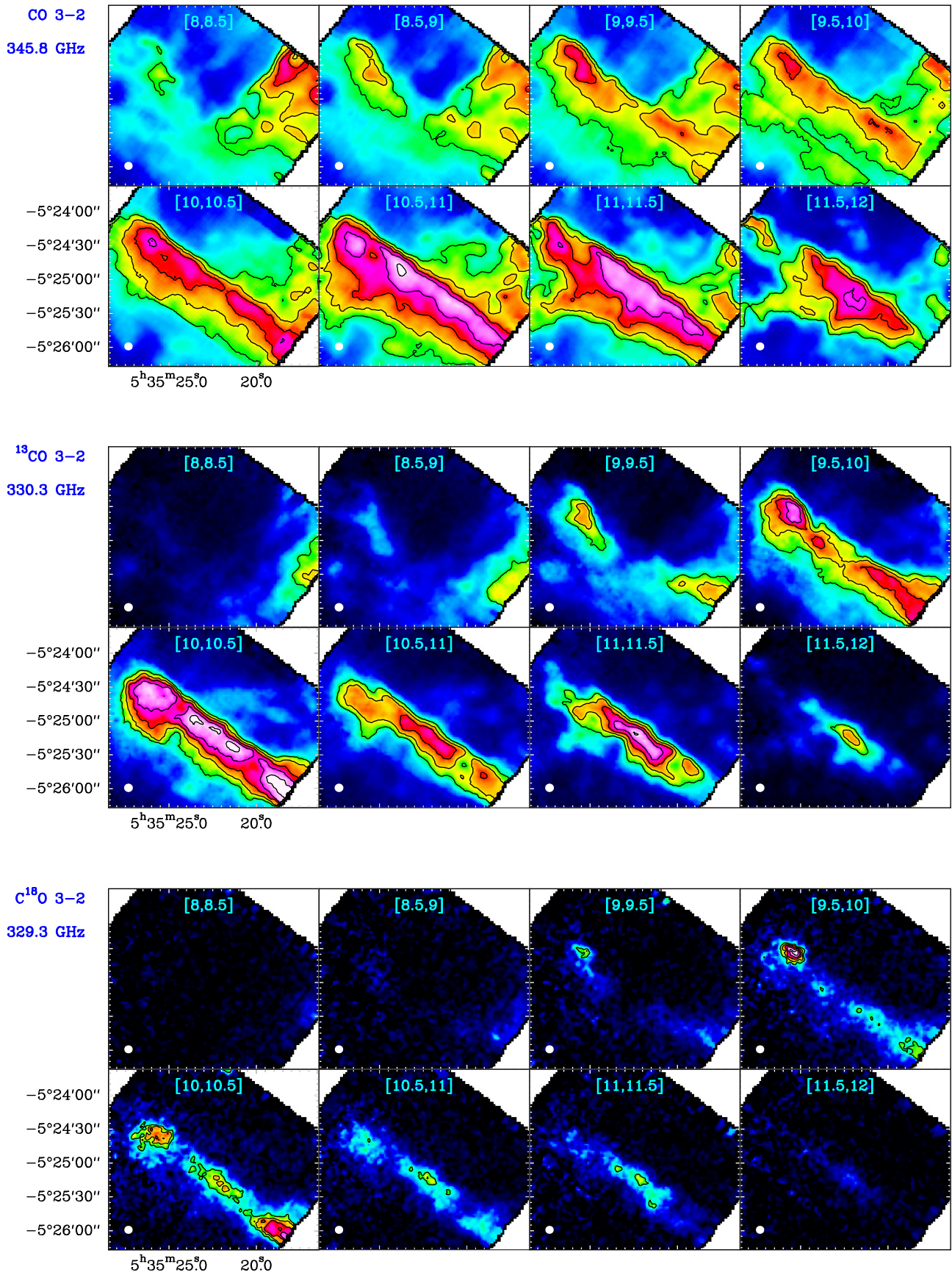


Figura 5.9: Mapas por canales de velocidad de las moléculas CO 3 → 2, ¹³CO 3 → 2, C¹⁸O 3 → 2, HCO⁺ 4 → 3, HCN 4 → 3, C₂H 4 → 3 y SO 8₉ → 7₈.

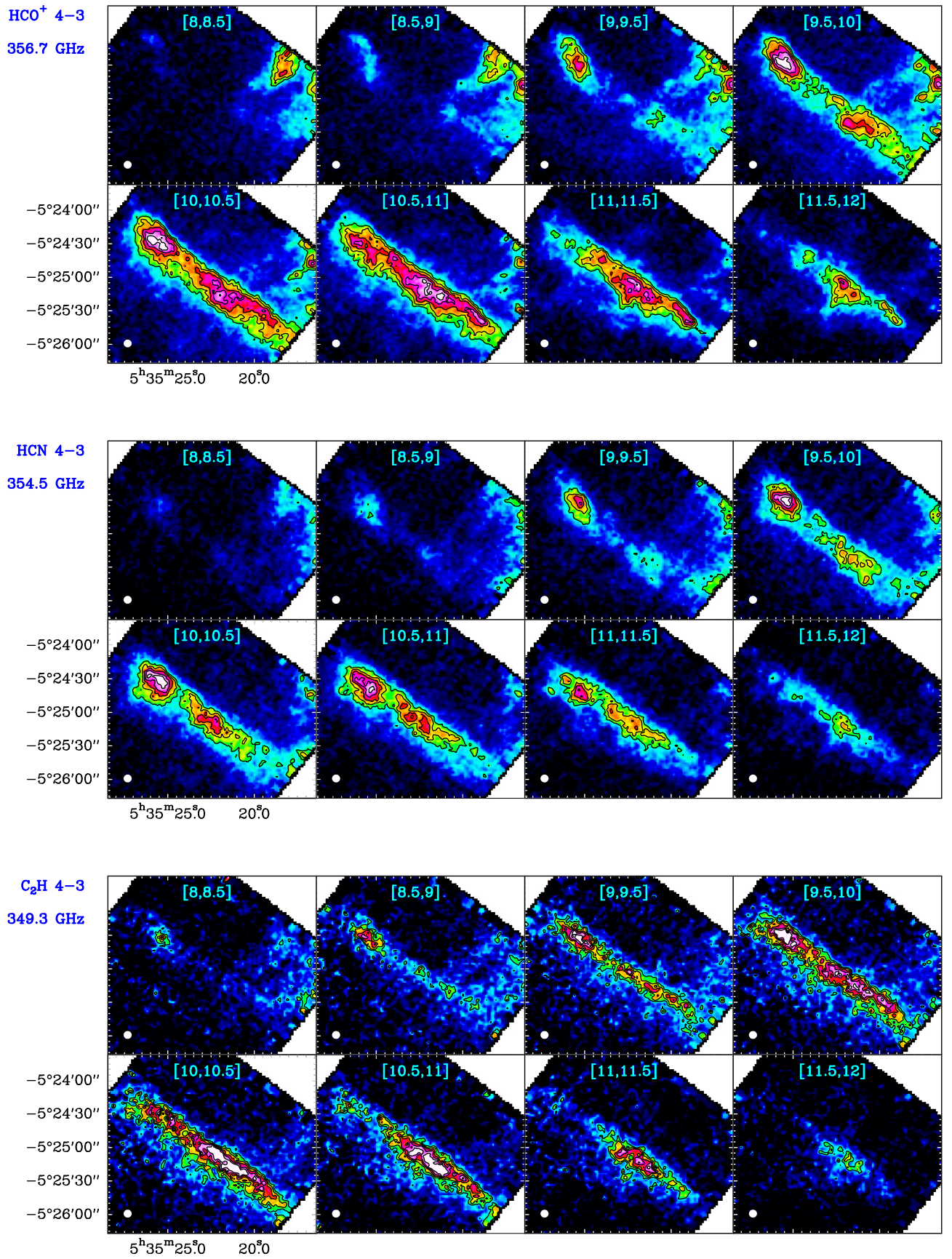


Figura 5.9: Continuación.

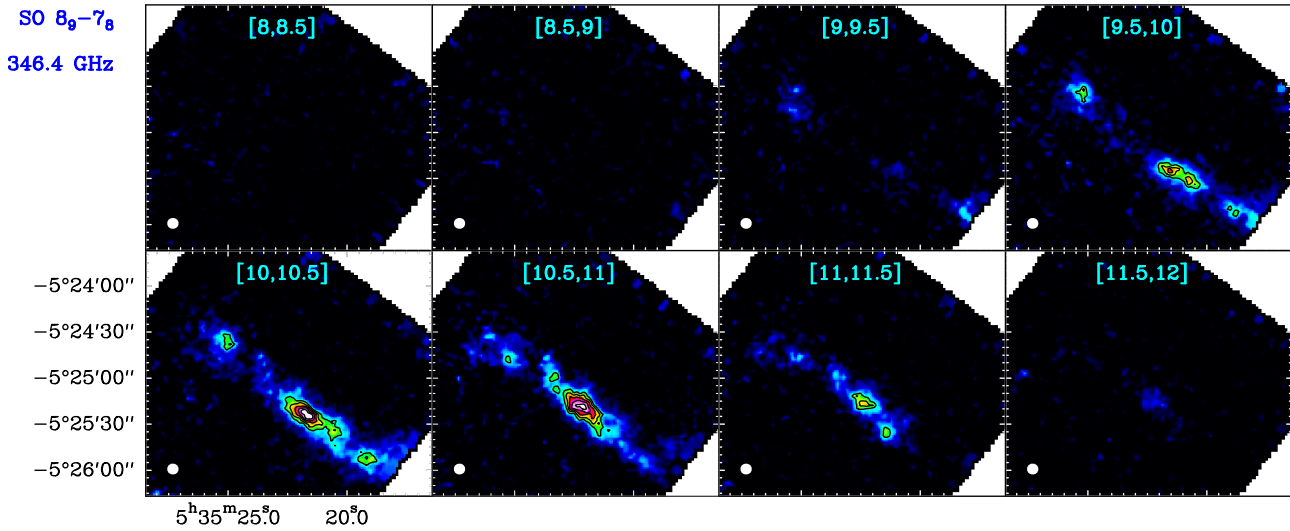


Figura 5.9: Continuación.

5.3.2. Estratificación química

Con el objetivo de investigar la estratificación química en función de la atenuación del flujo FUV a medida que aumenta la extinción visual de la PDR, se han realizado cortes promediados de la intensidad de línea integrada entre 0 y 20 km s^{-1} perpendiculares a la Barra. Los mapas se giraron 50° para que el campo de radiación FUV incidiese por el lado izquierdo, y a continuación, las intensidades de línea en el área mapeada se promediaron paralelas al frente de ionización. Se ha utilizado la resolución intrínseca de los mapas originales ($7''$). En la Fig. 5.10 se muestran los cortes de intensidad normalizada en función de la distancia al frente de ionización. Las distancias están en unidades de segundos de arco y aumentan con la extinción visual en la nube molecular. Aunque estos cortes no representan variaciones de abundancia (diferentes líneas tienen diferentes condiciones de excitación), en primer orden se pueden utilizar para estudiar la estratificación química en la PDR. El pico de emisión del hidrógeno molecular vibracionalmente excitado, H_2^* , está a una distancia de $\sim 15''$ (traza el frente de disociación; línea vertical punteada) del frente de ionización, y muestra un perfil de emisión estrecho.

Del análisis de los cortes promediados de la intensidad de línea de las especies estudiadas se puede concluir:

- El CO es más abundante hacia la superficie de la nube (frente de disociación), se auto-apantalla y es más difícil fotodisociarlo que el C^{18}O , el cual es muy ópticamente delgado y traza el interior de la nube.
- CN y C_2H son especies muy abundantes cerca del frente de disociación. Se consideran especies típicas de PDRs ya que en estas regiones es donde son más abundantes.
- El radical CN presenta su máximo de emisión más cerca del frente de disociación que el HCN. Esto es debido a que el CN es un producto de la fotodisociación del HCN ($\text{HCN} + h\nu \rightarrow \text{CN} + \text{H}$).
- El máximo de emisión del HCN se produce más hacia el interior que el HCO^+ . El cociente de abundancias $[\text{HCO}^+]/[\text{HCN}]$ aumenta hacia el frente de disociación.
- Al igual que el C^{18}O , el SO traza el interior de la nube. H_2CO sobrevive relativamente cerca del frente de disociación (Cuadrado et al. 2017).

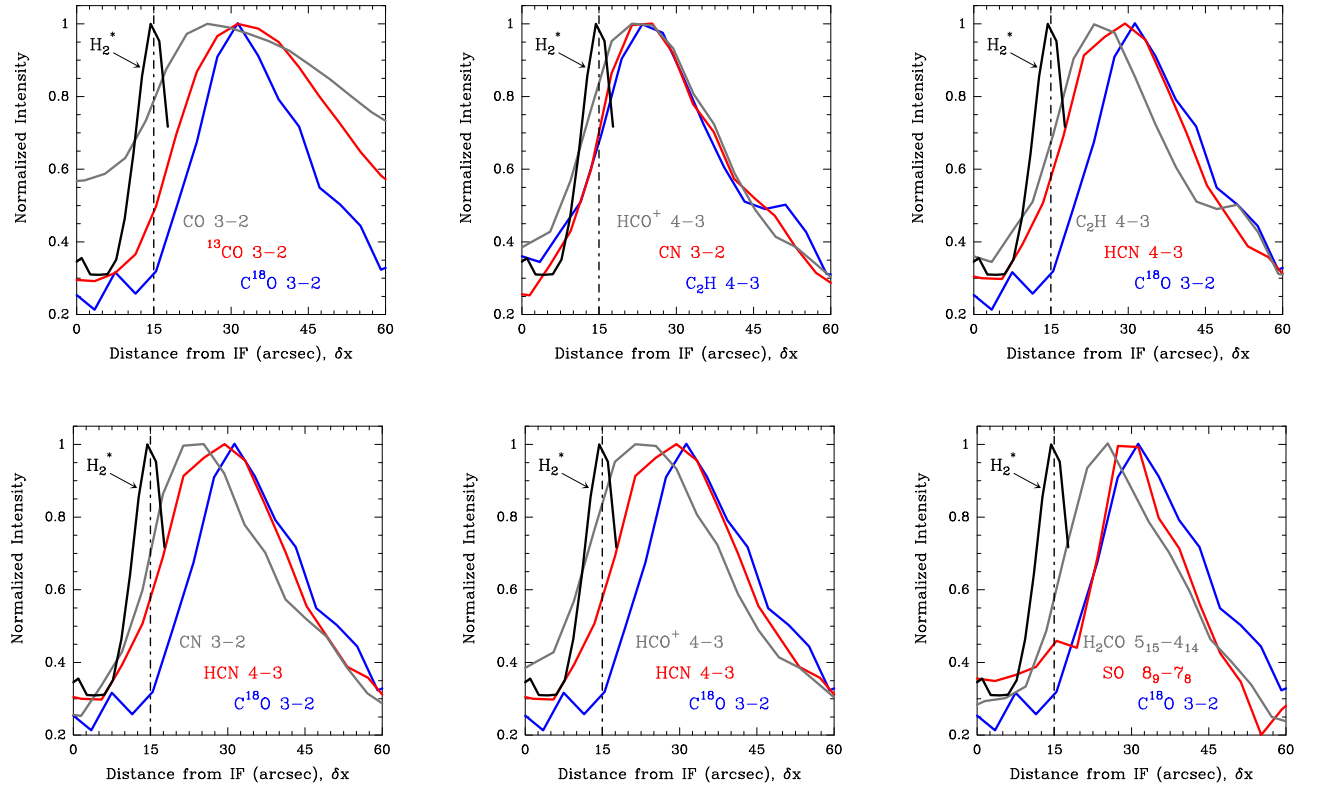


Figura 5.10: Promedios verticales de la intensidad de línea integrada entre $0 - 20 \text{ km s}^{-1}$ perpendiculares a la Barra de las moléculas $\text{CO } 3 \rightarrow 2$, $^{13}\text{CO } 3 \rightarrow 2$, $\text{C}^{18}\text{O } 3 \rightarrow 2$, $\text{HCO}^+ 4 \rightarrow 3$, $\text{H}_2\text{CO } 5_{1,5} \rightarrow 4_{1,4}$, $\text{HCN } 3 \rightarrow 2$, $\text{HCN } 4 \rightarrow 3$, $\text{C}_2\text{H } 4 \rightarrow 3$ y $\text{SO } 8_9 \rightarrow 7_8$. La resolución angular de los cartografiados de las moléculas observadas con IRAM-30m es de $7''$ y $\sim 1''$ para las observaciones de H_2^* .

Capítulo 6

Moléculas simples

6.1. Análisis

Un total de 270 líneas han sido asignadas a moléculas diatómicas y triatómicas (la mayoría radicales) que son comunes en el medio interestelar: CO, CN, NO, CS, NS, SiO, SO, SO₂, HCN, HNC, OCS, H₂S, y los cationes HCO⁺, HCS⁺ y N₂H⁺. La identificación de las líneas moleculares se ha realizado utilizando el catálogo espectral de J. Cernicharo (código MADEX; ver Sección 4.2), y las bases de datos moleculares de acceso público: JPL y CDMS (ver Capítulo 5). En este Capítulo se muestra el análisis de estas especies.

6.1.1. Ajuste de los parámetros de línea

Se han ajustado todas las líneas con perfiles Gaussianos usando el software CLASS para obtener sus intensidades integradas de línea, anchuras, velocidades LSR y temperaturas de antena. La anchura intrínseca de las líneas moleculares en la PDR de la Barra de Orión es $\sim 2 \text{ km s}^{-1}$, por lo que para poder resolver los perfiles de las líneas rotacionales, la resolución espectral del *backend* tiene que ser lo suficientemente alta. La resolución espectral de WILMA no permite que se resuelvan los estrechos perfiles de las líneas moleculares de la PDR, y por lo tanto las observaciones realizadas con WILMA sólo proporcionan información sobre la intensidad integrada de línea. La mayoría de las líneas

moleculares se han observado con los *backends* FFTS que sí permiten resolver espectralmente las líneas, proporcionando así información completa de su perfil (ver Capítulo 5).

En la Tabla 6.1 se muestran las moléculas simples detectadas en el barrido espectral junto con su momento dipolar y el número de líneas detectadas. Se indica también el número de Figura (Sección 6.2) donde se muestran los perfiles de las líneas detectadas a una resolución de 200 kHz (con intensidades de pico superiores a 3σ), y el número de Tabla (Sección 6.3) donde se muestran los parámetros espectroscópicos (del catálogo espectral MADEX y de las bases de datos moleculares JPL y CDMS) y observacionales (obtenidos a partir de ajustes Gaussianos) de cada transición rotacional: las frecuencias de línea (en MHz), la energía del nivel superior (E_u/k en K), el coeficiente de Einstein para la emisión espontánea (A_{ul} en s^{-1}), la intensidad de línea intrínseca (S_{ul}), la degeneración del nivel superior (g_u) de cada transición, la fuerza de línea ($\int T_{\text{MB}} dv$ en mK km s^{-1}), la velocidad LSR (v_{LSR} en km s^{-1}), la anchura de línea a media altura (Δv en km s^{-1}), la intensidad de la línea (T_{MB} en mK), y la relación señal-ruido (S/N) de cada línea observada. Los paréntesis indican la incertidumbre. Si dos o más transiciones están solapadas, se ha ajustado el perfil total de la línea. Las transiciones completamente solapadas están señaladas con símbolos de conexión en las tablas.

Tabla 6.1: Momento dipolar (μ), número de líneas detectadas, número de figura y tabla de las moléculas sencillas.

Molécula	μ [Debye]	No. Líneas	Fig.	Tabla	Molécula	μ [Debye]	No. Líneas	Fig.	Tabla
CO	0.110 ^a	3	6.3	6.3	SO ₂	1.633 ^l	32	6.10	6.10
¹³ CO	0.110 ^a	3	6.3	6.3	HCO ⁺	3.922 ^m	3	6.12	6.11
C ¹⁸ O	0.110 ^a	3	6.3	6.3	H ¹³ CO ⁺	3.922 ^m	4	6.12	6.11
C ¹⁷ O	0.110 ^a	4	6.3	6.3	HC ¹⁸ O ⁺	3.922 ^m	3	6.12	6.11
¹³ C ¹⁸ O	0.110 ^a	2	6.3	6.3	DCO ⁺	3.922 ^m	1	6.12	6.11
¹³ C ¹⁷ O	0.110 ^a	1	6.3	6.3	HCS ⁺	1.958 ^o	7	6.11	6.12
CN	1.450 ^d	36	6.4	6.4	HCN	2.985 ^p	5	6.13	6.13
¹³ CN	1.450 ^d	25	6.4	6.4	H ¹³ CN	2.985 ^p	6	6.13	6.13
C ¹⁵ N	1.450 ^d	5	6.4	6.4	DCN	2.999 ^q	3	6.13	6.13
NO	0.159 ^e	10	6.5	6.5	HC ¹⁵ N	2.985 ^p	4	6.13	6.13
CS	1.958 ^f	5	6.6	6.6	HNC	3.050 ^r	2	6.14	6.14
¹³ CS	1.958 ^f	4	6.6	6.6	HN ¹³ C	3.050 ^r	2	6.14	6.14
C ³⁴ S	1.958 ^f	4	6.6	6.6	H ¹⁵ NC	3.050 ^r	2	6.14	6.14
C ³³ S	1.958 ^f	5	6.6	6.6	DNC	3.050 ^r	1	6.14	6.14
¹³ C ³⁴ S	1.958 ^f	2	6.6	6.6	OCS	0.715 ^s	8	6.15	6.15
NS	1.810 ^g	22	6.7	6.7	H ₂ S	0.978 ^t	2	6.16	6.16
SiO	3.098 ^h	7	6.8	6.8	H ₂ ³⁴ S	0.975 ^t	1	6.16	6.16
SO	1.535 ^k	24	6.9	6.9	N ₂ H ⁺	3.400 ^u	4	6.17	6.17
³⁴ SO	1.535 ^k	14	6.9	6.9					

Notas. Ref. ^a Goorvitch et al. 1994, ^d Thomson et al. 1968, ^e Neumann et al. 1970, ^f Winniewisser et al. 1968, ^g Amano et al. 1969, ^h Raymonda et al. 1970, ^k Lovas et al. 1992, Powell et al. 1964, ^l Patel et al. 1979, ^m Mount et al. 2012, ^o Botschwina et al. 1985, ^p Ebenstein et al. 1984, ^q DeLeon et al. 1984, ^r Blackman et al. 1976, ^s Tanaka et al. 1985, ^t Viswanathan et al. 1984, ^u Havenith et al. 1990.

6.1.2. Diagramas de rotación

Para todas las moléculas estudiadas se ha determinado la temperatura de rotación (T_{rot}) y la densidad de columna (N) con la construcción de diagramas de rotación (ver Sección 4.1). El gran número de líneas detectadas de cada molécula permite determinar estos parámetros con precisión.

Los diagramas de rotación se han calculado para dos casos límite: (i) suponiendo que la emisión es extensa (llenado uniforme del haz del telescopio) con $\eta_{\text{bf}} = 1$, y (ii) suponiendo que la fuente tiene un tamaño de $\theta_s = 9''$ (fuente semi-extensa), que se corresponde con el tamaño del haz del telescopio IRAM-30m a ~ 1 mm. Para la construcción de los diagramas de rotación sólo se tuvieron en cuenta líneas que no estuviesen solapadas con otras transiciones y que fuesen detectadas por encima de un nivel 3σ . En la Fig. 6.1

se muestran los diagramas de rotación de las especies estudiadas (para el caso de emisión extensa) con más de una transición detectada en el barrido espectral. En la Tabla 6.2 se muestran las temperaturas de rotación y las densidades de columna obtenidas por medio de ajustes lineales por mínimos cuadrados (y las incertidumbres en los cálculos). La incertidumbre obtenida en la determinación de los parámetros de línea con el programa de ajuste Gaussiano se incluye en las barras de error en cada punto del diagrama de rotación.

Debido a la compleja espectroscopía de la molécula SO₂ y a las condiciones de excitación predominantes en la Barra (excitación subtérmica, $T_{\text{rot}} \ll T_k$), la correcta determinación de la densidad de columna de esta especie asimétri-

ca requiere construir diagramas de rotación específicos para cada escalera rotacional de $\Delta J = 0$ y 1.

Para construir el diagrama de rotación de las moléculas con estructura fina e hiperfina, como CN, ^{13}CN , C^{15}N , NO, NS y N_2H^+ , cada transición rotacional se ha descrito con un único número cuántico de rotación N , es decir, sin desdoblamientos. Para ello, la intensidad integrada, la degeneración de nivel y la fuerza de línea de cada transición se ha calculado como el sumatorio de todas las componentes hiperfinas permitidas de cada transición $N + 1 \rightarrow N$. La frecuencia característica se ha calculado con la media ponderada con la fuerza relativa de cada línea. Con estos valores se ha determinado el coeficiente de Einstein de cada transición.

En algunas moléculas sólo se han detectado dos transiciones (e.g. HNC, HN^{13}C , H^{15}NC) por lo que los resultados obtenidos a partir de los diagramas de rotación no serán

tan fiables, aunque siempre superiores a la detección de una única línea.

En la Fig. 6.2 se resumen los datos obtenidos del análisis de los diagramas de rotación. Las temperaturas de rotación calculadas son bajas para la mayoría de las moléculas (< 30 K), excepto para NS y OCS (> 40 K), mucho menores que la temperatura del gas, lo que es consistente con una excitación subtérmica. CO, ^{13}CO , CN, ^{13}CN , CS, ^{13}CS , HCO^+ , HCN y HNC son las moléculas con mayor columna de densidad.

Para confirmar la correcta identificación de las líneas y comprobar que no existen solapamientos, se ha modelado el espectro de cada molécula usando el código de transferencia radiativa MADEX (ver Sección 4.2) asumiendo una distribución de Boltzmann y una temperatura de excitación para la población de niveles rotacionales.

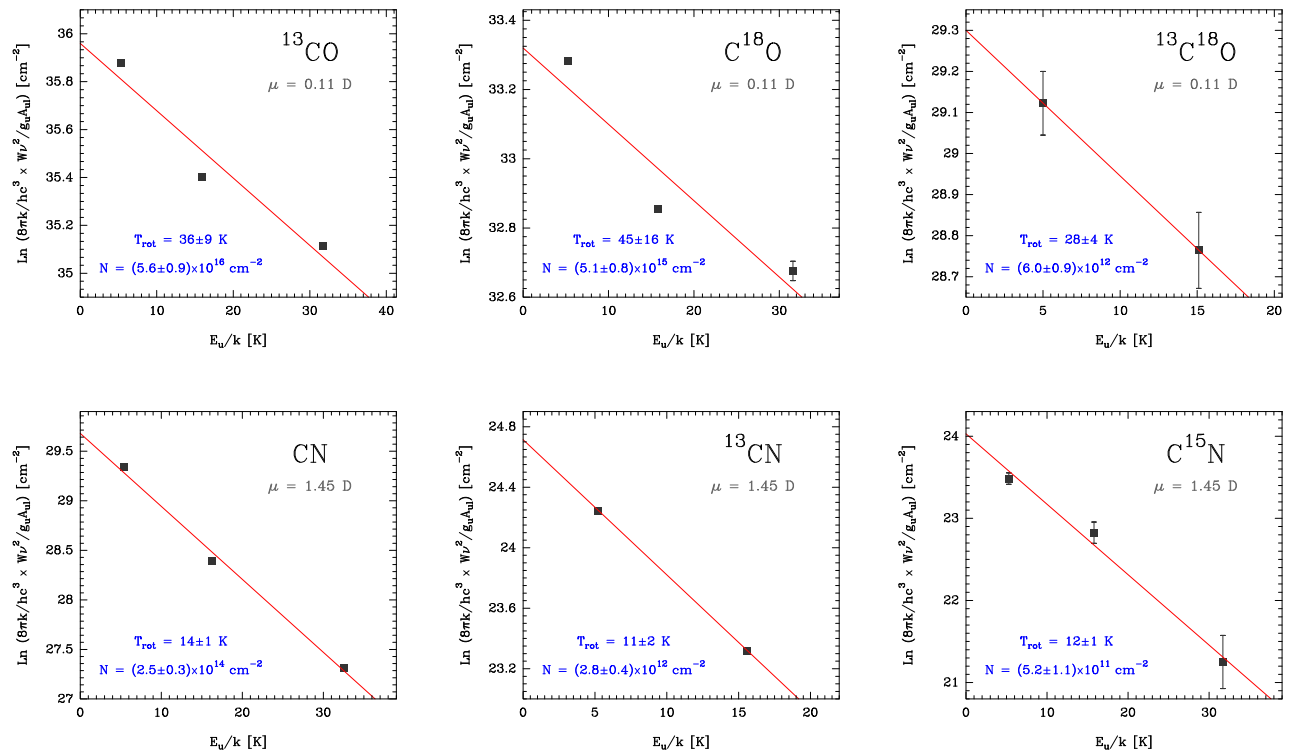


Figura 6.1: Diagramas de rotación de las moléculas simples (diatómicas y triatómicas) detectadas en el frente de disociación de la Barra de Orión. Para cada molécula se indica la temperatura rotacional, T_{rot} , y la densidad de columna, N .

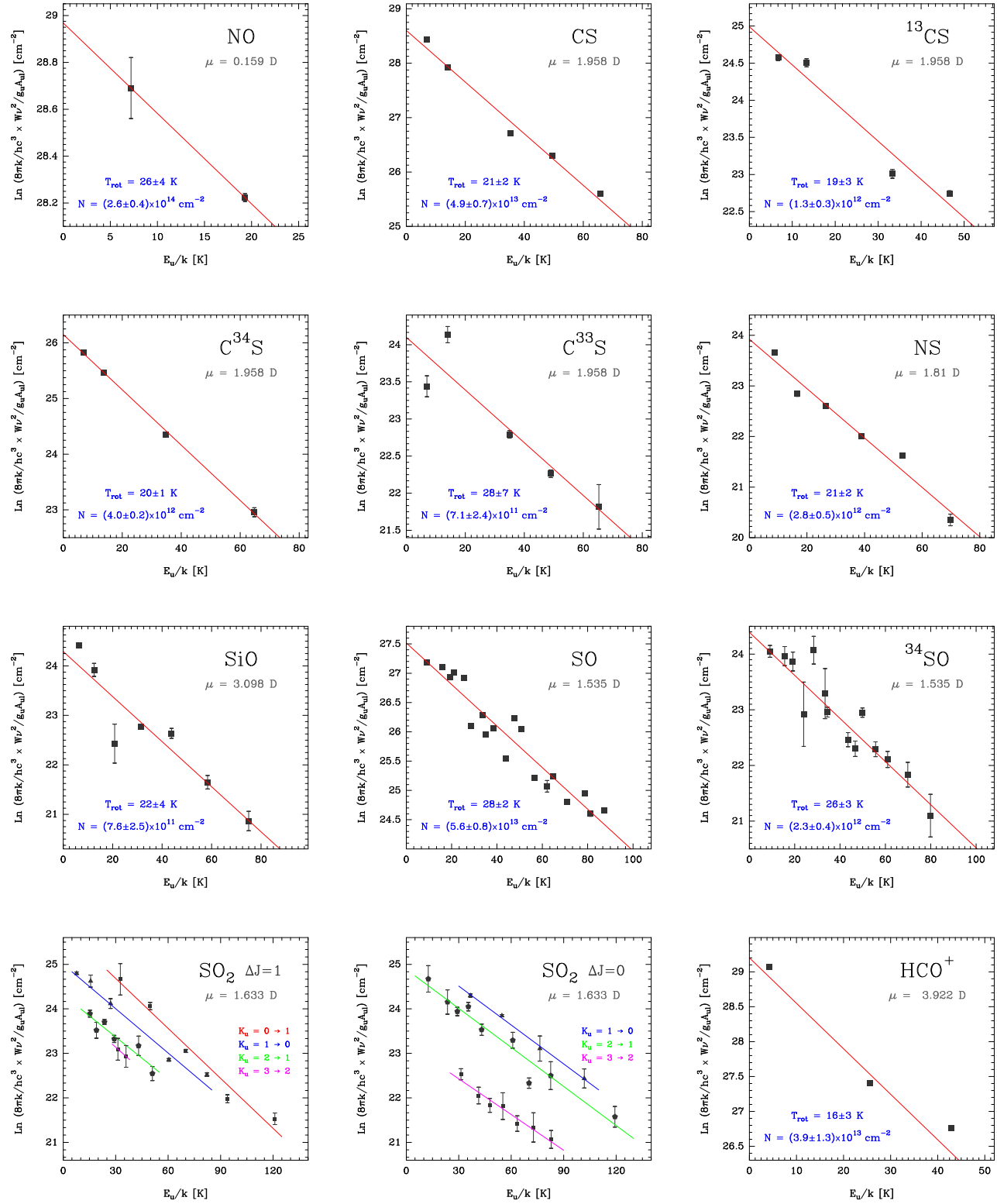


Figura 6.1: Continuación.

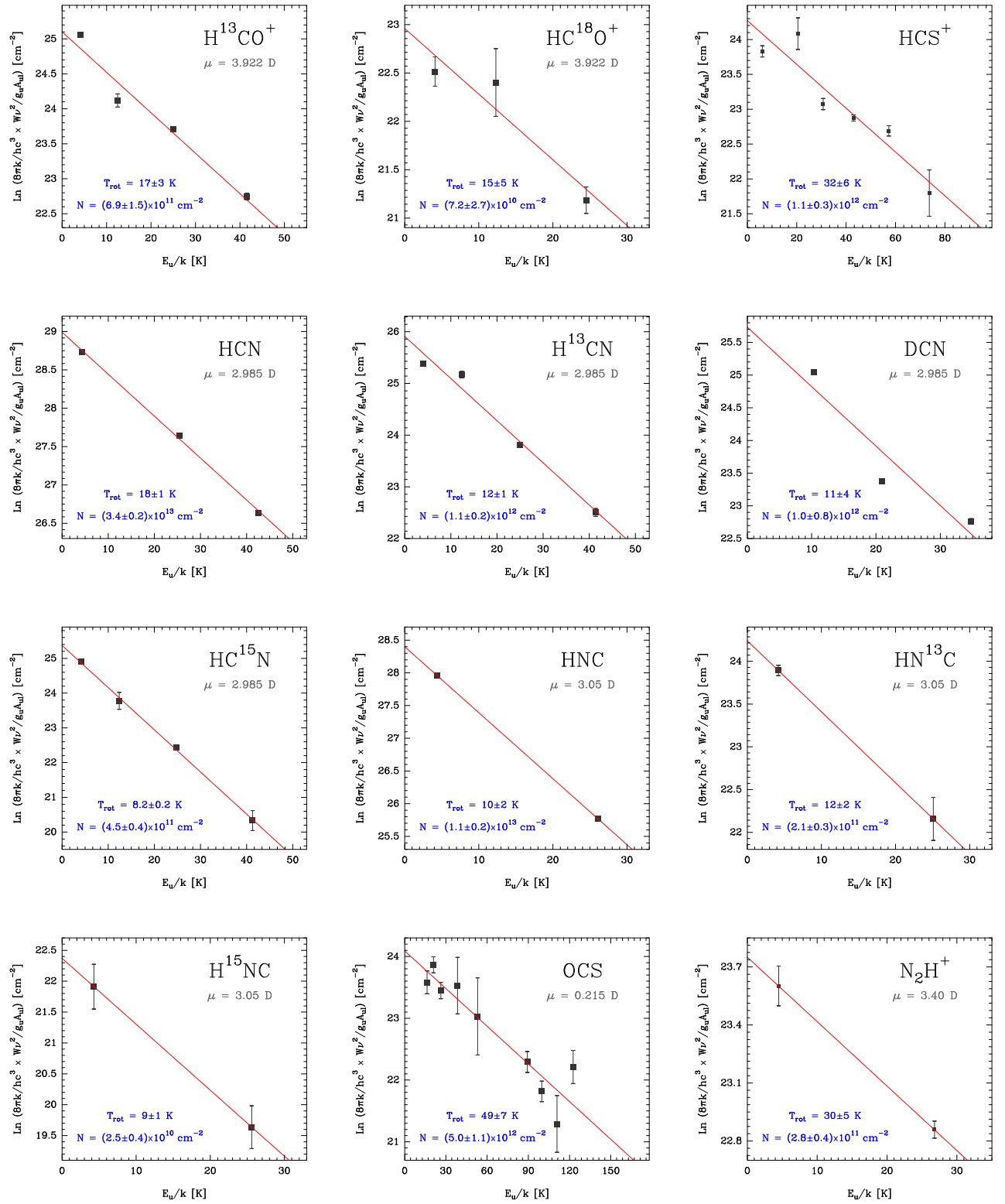


Figura 6.1: Continuación.

Tabla 6.2: T_{rot} , N y abundancias inferidas en el frente de disociación de la Barra de Orión.

	Fuente Extensa		Fuente Semi-extensa		Abundancia*	Notas
	T_{rot} [K]	$N(X)$ [cm ⁻²]	T_{rot} [K]	$N(X)$ [cm ⁻²]		
CO	17 ± 5	$(3.8 \pm 1.2) \times 10^{17}$	9 ± 3	$(1.6 \pm 1.1) \times 10^{18}$	$(0.6 - 2.5) \times 10^{-5}$	a, b
¹³ CO	36 ± 9	$(5.6 \pm 0.9) \times 10^{16}$	12 ± 4	$(1.6 \pm 0.9) \times 10^{17}$	$(0.9 - 2.5) \times 10^{-6}$	a, b
C ¹⁸ O	45 ± 16	$(5.1 \pm 0.8) \times 10^{15}$	13 ± 5	$(1.2 \pm 0.7) \times 10^{16}$	$(0.8 - 1.9) \times 10^{-7}$	a
C ¹⁷ O	20	6.0×10^{14}	—	—	9.5×10^{-9}	c
¹³ C ¹⁸ O	28 ± 4	$(6.0 \pm 0.9) \times 10^{13}$	7 ± 1	$(2.2 \pm 0.3) \times 10^{14}$	$(1.0 - 3.5) \times 10^{-9}$	a
CN	14 ± 1	$(2.5 \pm 0.3) \times 10^{14}$	8 ± 2	$(1.2 \pm 0.6) \times 10^{15}$	$(0.4 - 1.9) \times 10^{-8}$	a
¹³ CN	11 ± 2	$(2.8 \pm 0.4) \times 10^{12}$	6 ± 1	$(1.8 \pm 0.3) \times 10^{13}$	$(0.4 - 2.9) \times 10^{-10}$	a
C ¹⁵ N	12 ± 1	$(5.2 \pm 1.1) \times 10^{11}$	7 ± 1	$(2.7 \pm 0.6) \times 10^{12}$	$(0.8 - 4.3) \times 10^{-11}$	a
NO	26 ± 4	$(2.6 \pm 0.4) \times 10^{14}$	11 ± 2	$(7.8 \pm 1.2) \times 10^{14}$	$(0.4 - 1.2) \times 10^{-8}$	a
CS	21 ± 2	$(4.9 \pm 0.7) \times 10^{13}$	13 ± 2	$(2.5 \pm 1.0) \times 10^{14}$	$(0.8 - 4.0) \times 10^{-9}$	a
¹³ CS	19 ± 3	$(1.3 \pm 0.3) \times 10^{12}$	11 ± 2	$(7.4 \pm 2.7) \times 10^{12}$	$(0.2 - 1.2) \times 10^{-10}$	a
C ³⁴ S	20 ± 1	$(4.0 \pm 0.2) \times 10^{12}$	13 ± 2	$(2.1 \pm 0.7) \times 10^{13}$	$(0.6 - 3.3) \times 10^{-10}$	a
C ³³ S	28 ± 7	$(7.1 \pm 2.4) \times 10^{11}$	16 ± 2	$(3.2 \pm 0.9) \times 10^{12}$	$(1.1 - 5.1) \times 10^{-11}$	a
¹³ C ³⁴ S	20	1.0×10^{11}	—	—	1.6×10^{-12}	d
NS	21 ± 2	$(2.8 \pm 0.5) \times 10^{12}$	14 ± 1	$(1.2 \pm 0.3) \times 10^{13}$	$(0.4 - 1.9) \times 10^{-10}$	a
SiO	22 ± 4	$(7.6 \pm 2.5) \times 10^{11}$	14 ± 2	$(3.7 \pm 1.8) \times 10^{12}$	$(1.2 - 5.9) \times 10^{-11}$	a
SO	28 ± 2	$(5.6 \pm 0.8) \times 10^{13}$	17 ± 1	$(2.6 \pm 0.6) \times 10^{14}$	$(0.9 - 4.1) \times 10^{-9}$	a
³⁴ SO	26 ± 3	$(2.3 \pm 0.4) \times 10^{12}$	16 ± 2	$(1.2 \pm 0.4) \times 10^{13}$	$(0.4 - 1.9) \times 10^{-10}$	a
SO ₂ $K=0-1$, $\Delta J=1$	27 ± 3	$(3.9 \pm 1.1) \times 10^{12}$	20 ± 2	$(2.1 \pm 0.9) \times 10^{13}$	—	a
SO ₂ $K=1-0$, $\Delta J=0$	34 ± 1	$(3.4 \pm 0.3) \times 10^{12}$	21 ± 1	$(4.3 \pm 0.6) \times 10^{13}$	—	a
SO ₂ $K=1-0$, $\Delta J=1$	33 ± 3	$(2.5 \pm 2.0) \times 10^{12}$	23 ± 2	$(1.1 \pm 0.3) \times 10^{13}$	—	a
SO ₂ $K=2-1$, $\Delta J=0$	34 ± 3	$(3.4 \pm 0.5) \times 10^{12}$	30 ± 3	$(1.4 \pm 0.3) \times 10^{13}$	—	a
SO ₂ $K=2-1$, $\Delta J=1$	32 ± 6	$(1.7 \pm 0.3) \times 10^{12}$	23 ± 3	$(3.3 \pm 0.6) \times 10^{12}$	—	a
SO ₂ $K=3-2$, $\Delta J=1$	29 ± 4	$(7.9 \pm 1.1) \times 10^{11}$	22 ± 3	$(1.1 \pm 0.2) \times 10^{12}$	—	a
SO ₂ $K=3-2$, $\Delta J=0$	37 ± 4	$(4.9 \pm 0.7) \times 10^{11}$	36 ± 5	$(1.0 \pm 0.2) \times 10^{12}$	—	a
SO ₂ Total	—	$(1.6 \pm 0.2) \times 10^{13}$	—	$(9.2 \pm 1.1) \times 10^{13}$	$(0.3 - 1.5) \times 10^{-9}$	e
HCO ⁺	16 ± 3	$(3.9 \pm 1.3) \times 10^{13}$	9 ± 2	$(2.4 \pm 2.0) \times 10^{14}$	$(0.6 - 3.8) \times 10^{-9}$	a, b
H ¹³ CO ⁺	17 ± 3	$(6.9 \pm 1.5) \times 10^{11}$	10 ± 2	$(3.6 \pm 2.1) \times 10^{12}$	$(1.1 - 5.7) \times 10^{-11}$	a
HC ¹⁸ O ⁺	15 ± 5	$(7.2 \pm 2.7) \times 10^{10}$	7 ± 1	$(4.5 \pm 0.2) \times 10^{11}$	$(1.1 - 7.1) \times 10^{-12}$	a
DCO ⁺	20	4.0×10^{10}	—	—	6.3×10^{-13}	d
HCS ⁺	32 ± 6	$(1.1 \pm 0.3) \times 10^{12}$	18 ± 2	$(4.9 \pm 1.4) \times 10^{12}$	$(1.7 - 7.8) \times 10^{-11}$	a

Notas. * La abundancia de cada especie con respecto a la densidad de columna total de átomos de hidrógeno en forma atómica o molecular se calcula como $\frac{N(X)}{N_H} = \frac{N(X)}{N(H) + 2N(H_2)}$, con $N(H_2) \simeq 3 \times 10^{22} \text{ cm}^{-2}$ y $N(H) \simeq 3 \times 10^{21} \text{ cm}^{-2}$ (van der Werf et al. 2013). (a) T_{rot} y N calculados a partir del diagrama rotacional. (b) Líneas ópticamente espesas. (c) El análisis del diagrama rotacional no fue concluyente. N ha sido calculada con el código MADEX asumiendo una distribución de Boltzmann y una temperatura de excitación de 20 K suponiendo que la emisión es extensa. (d) Solo una línea detectada. N ha sido calculada con el código MADEX asumiendo una distribución de Boltzmann y una temperatura de excitación de 20 K suponiendo que la emisión es extensa. (e) N total calculada como la suma de la N de cada escalera rotacional. (f) Solo una línea detectada. N ha sido calculada con el código MADEX asumiendo una distribución de Boltzmann y una temperatura de excitación de 10 K suponiendo que la emisión es extensa.

Tabla 6.2: Continuación.

	Fuente Extensa		Fuente Semi-extensa		Abundancia*	Notas
	T_{rot} [K]	$N(X)$ [cm ⁻²]	T_{rot} [K]	$N(X)$ [cm ⁻²]		
HCN	18 ± 1	$(3.4 \pm 0.2) \times 10^{13}$	10 ± 1	$(2.1 \pm 0.9) \times 10^{14}$	$(0.5 - 3.3) \times 10^{-9}$	a, b
H ¹³ CN	12 ± 1	$(1.1 \pm 0.2) \times 10^{12}$	8 ± 1	$(6.6 \pm 1.9) \times 10^{12}$	$(0.2 - 1.0) \times 10^{-10}$	a, b
DCN	11 ± 4	$(1.0 \pm 0.8) \times 10^{12}$	8 ± 3	$(4.5 \pm 4.4) \times 10^{12}$	$(1.6 - 7.1) \times 10^{-11}$	a
HC ¹⁵ N	8 ± 1	$(4.5 \pm 0.4) \times 10^{11}$	6 ± 1	$(3.1 \pm 1.3) \times 10^{12}$	$(0.7 - 4.9) \times 10^{-11}$	a
HNC	10 ± 1	$(1.1 \pm 0.2) \times 10^{13}$	6 ± 1	$(9.5 \pm 1.4) \times 10^{13}$	$(0.2 - 1.5) \times 10^{-9}$	a
HN ¹³ C	12 ± 2	$(2.1 \pm 0.3) \times 10^{11}$	6 ± 1	$(1.6 \pm 0.2) \times 10^{12}$	$(0.3 - 2.5) \times 10^{-11}$	a
DNC	10	7.0×10^{10}	—	—	1.1×10^{-12}	f
H ¹⁵ NC	9 ± 1	$(2.5 \pm 0.4) \times 10^{10}$	6 ± 1	$(2.2 \pm 0.3) \times 10^{11}$	$(0.4 - 3.5) \times 10^{-12}$	a
OCS	49 ± 7	$(4.9 \pm 1.1) \times 10^{12}$	29 ± 3	$(3.1 \pm 0.8) \times 10^{13}$	$(0.8 - 4.9) \times 10^{-10}$	a
o-H ₂ S	20	8.0×10^{13}	—	—	1.3×10^{-9}	d
p-H ₂ S	20	2.0×10^{13}	—	—	3.2×10^{-10}	d
o-H ₂ ³⁴ S	20	7.0×10^{12}	—	—	1.1×10^{-10}	d
N ₂ H ⁺	30 ± 5	$(2.8 \pm 0.4) \times 10^{11}$	10 ± 1	$(1.3 \pm 0.2) \times 10^{12}$	$(0.5 - 2.0) \times 10^{-11}$	a

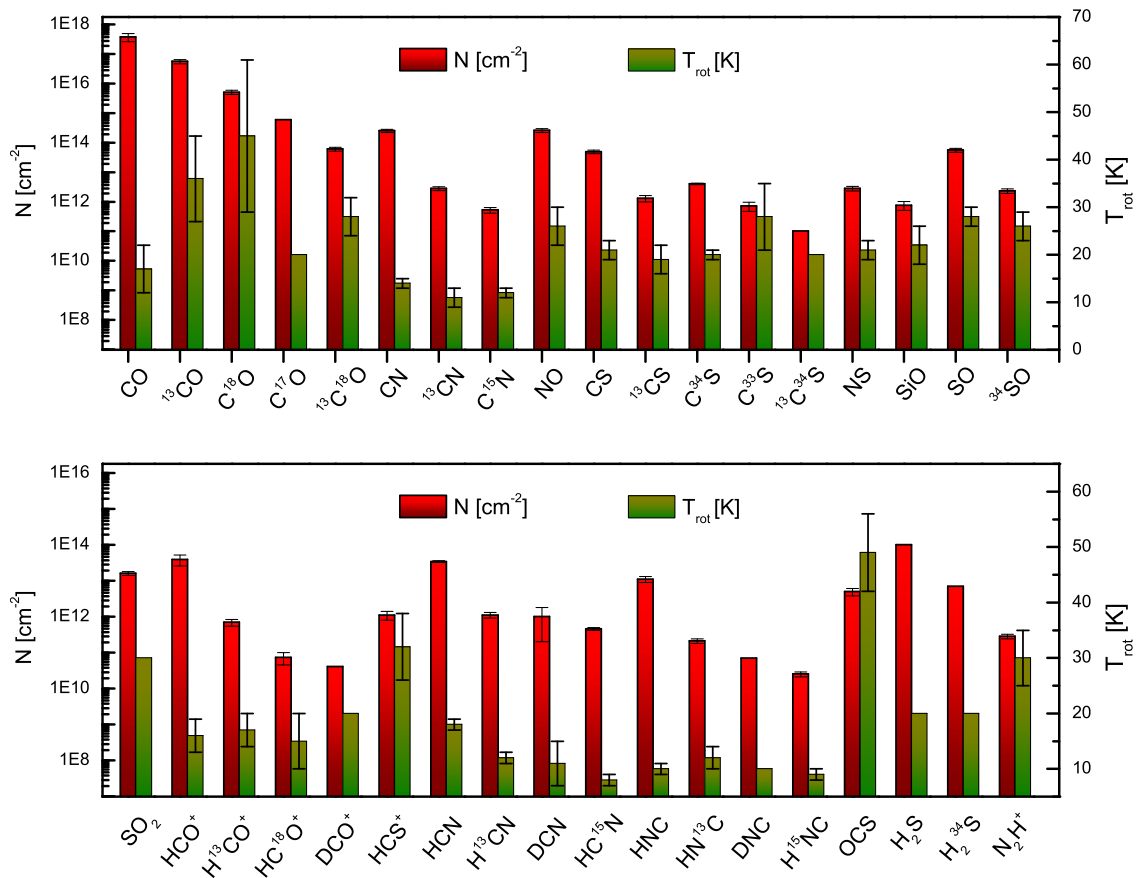


Figura 6.2: Densidades de columna (histograma verde; eje izquierdo) y temperaturas rotacionales (histograma rojo; eje derecho) de las moléculas simples detectadas en el frente de disociación de Barra de Orión.

6.1.3. Abundancias

Con el objetivo de determinar las abundancias moleculares con respecto a los núcleos de hidrógeno, $N_H = N(H) + 2N(H_2)$, en la posición del barrido espectral, se ha obtenido la densidad de columna H_2 a partir del análisis de las líneas ópticamente delgadas de $C^{18}O$ (las transiciones observadas fueron $J = 1 \rightarrow 0$, $2 \rightarrow 1$ y $3 \rightarrow 2$) y suponiendo una relación de abundancias $^{16}O/^{18}O \simeq 500$ (Wilson & Rood 1994) y $[CO]/[H_2] \simeq 10^{-4}$ (Hogerheijde et al. 1995; inferior al valor canónico debido a la fotodisociación). La densidad de columna de H_2 calcula-

da, $N(H_2) \simeq 3 \times 10^{22} \text{ cm}^{-2}$, está en concordancia con estimaciones previas de $N(H_2)$ cerca del frente de disociación (e.g. Hogerheijde et al. 1995). A partir de observaciones de HI hacia el borde de la Barra de Orión se ha inferido una densidad de columna de átomos de hidrógeno de $N(H) \simeq 3 \times 10^{21} \text{ cm}^{-2}$ (van der Werf et al. 2013). Las abundancias moleculares con respecto a los núcleos de hidrógeno se enumeran en la Tabla 6.2. Las abundancias de las especies detectadas varían entre $10^{-5} - 10^{-12}$.

6.2. Perfiles de línea

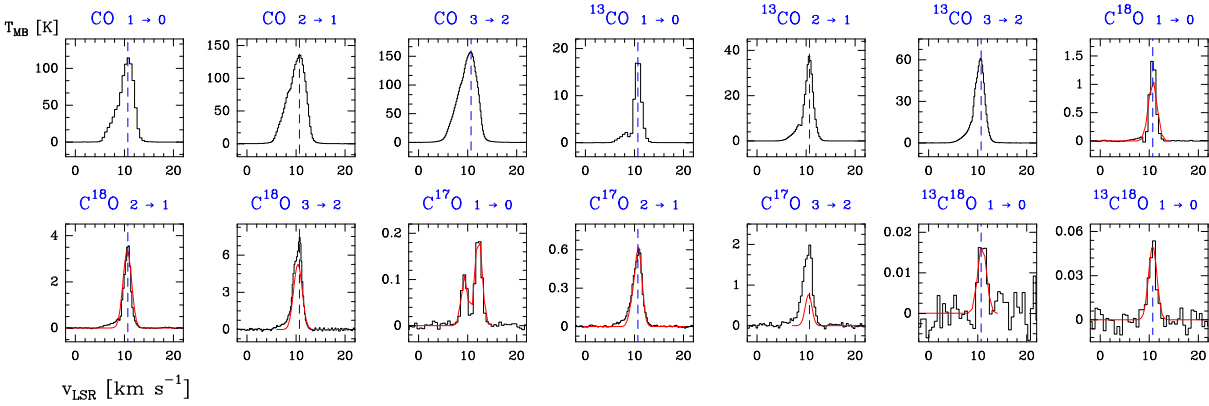


Figura 6.3: Líneas detectadas de CO y de sus isotópologos (histograma negro). En rojo se muestra el modelado el espectro de cada especie usando el código de transferencia radiativa MADEX (ver Sección 4.2) asumiendo una distribución de Boltzmann y una temperatura de excitación para la población de niveles rotacionales.

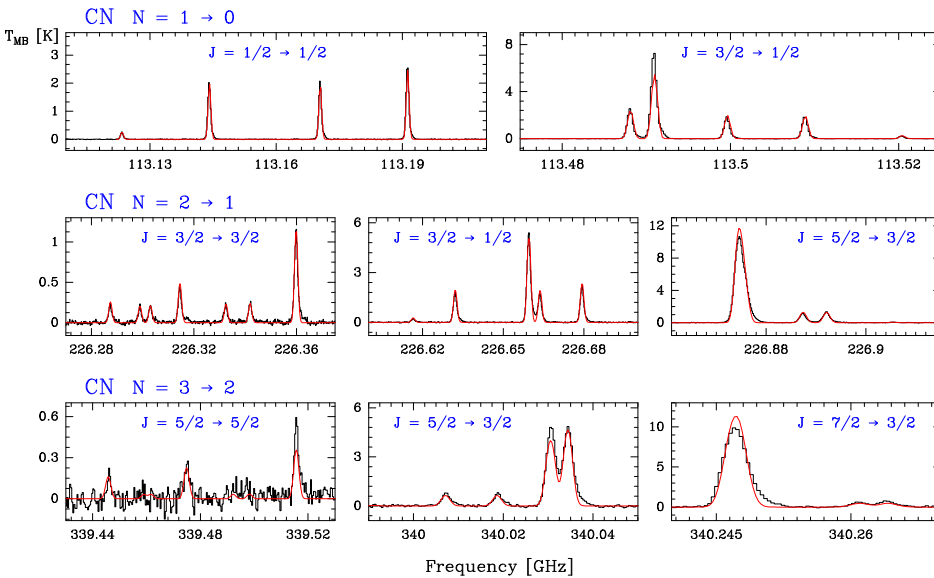


Figura 6.4: Líneas detectadas de CN y de sus isotópologos.

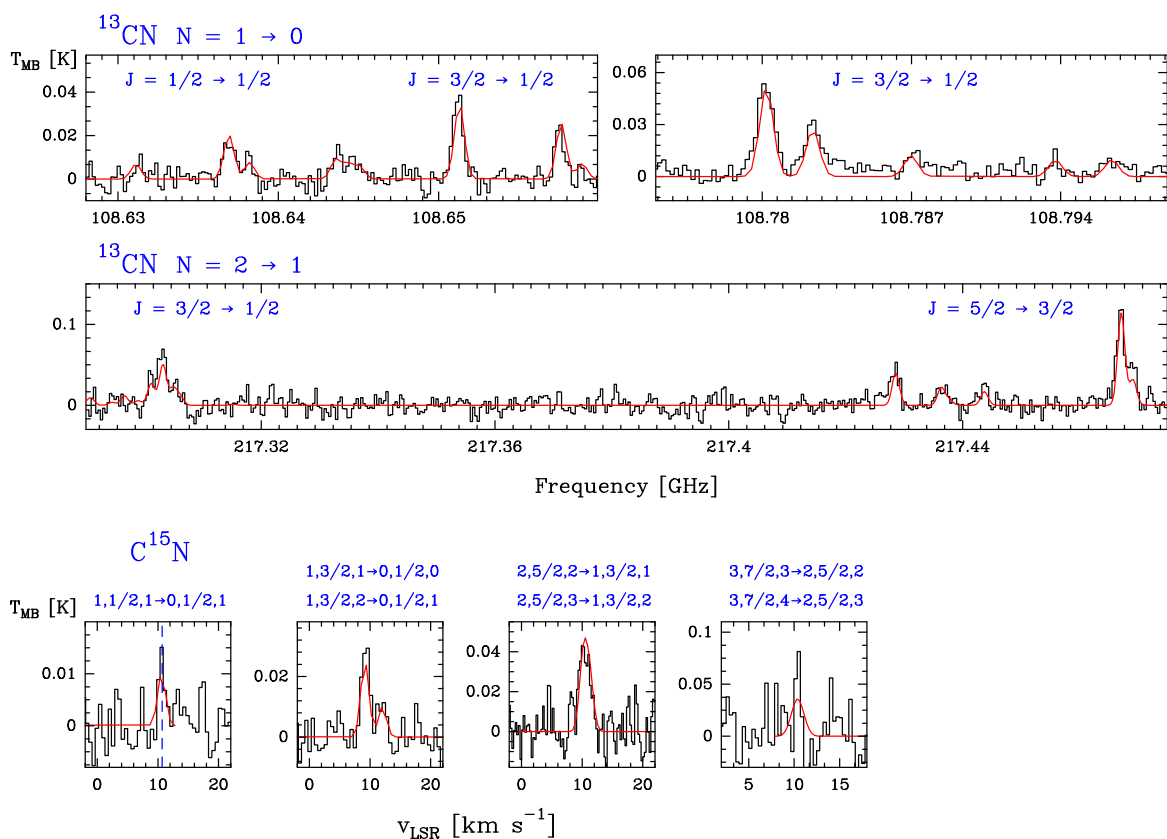


Figura 6.4: Continuación.

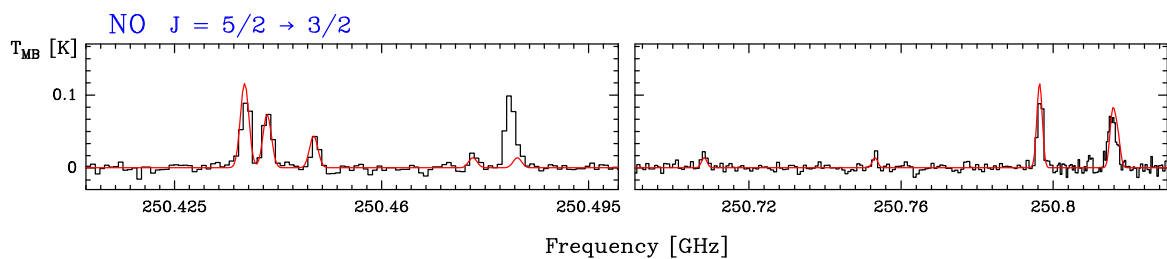


Figura 6.5: Ejemplos de líneas detectadas de NO.

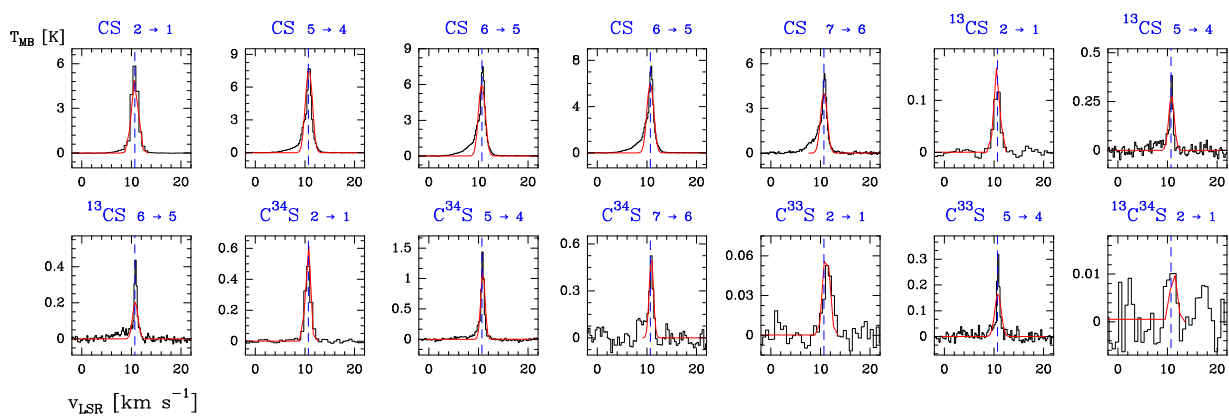


Figura 6.6: Líneas detectadas de CS y de sus isotopólogos.

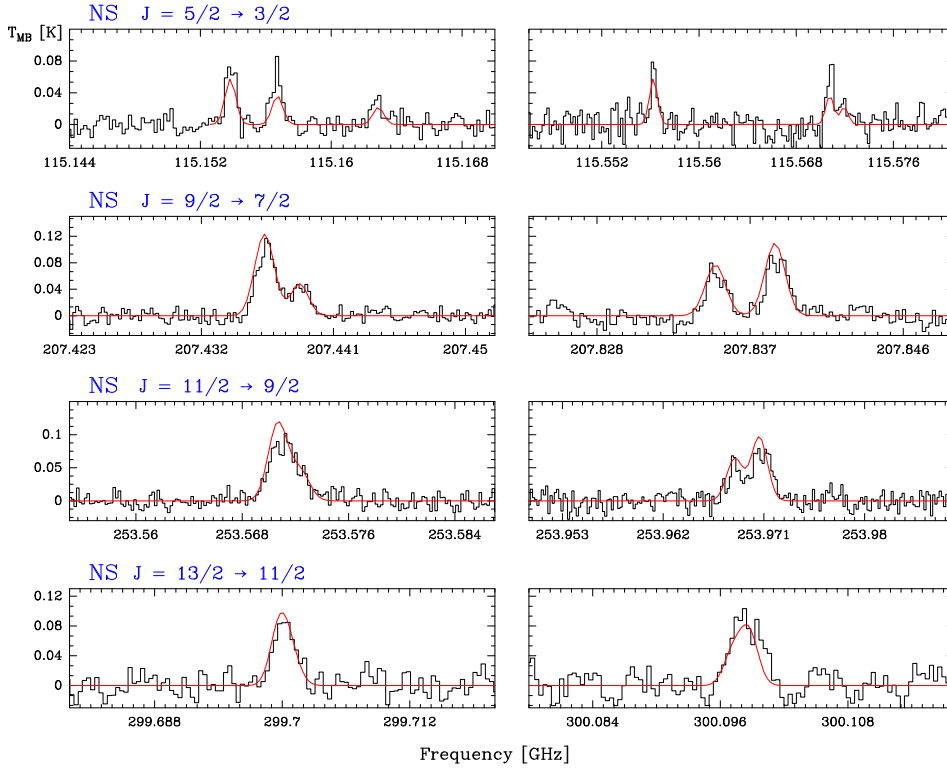


Figura 6.7: Ejemplos de líneas detectadas de NS.

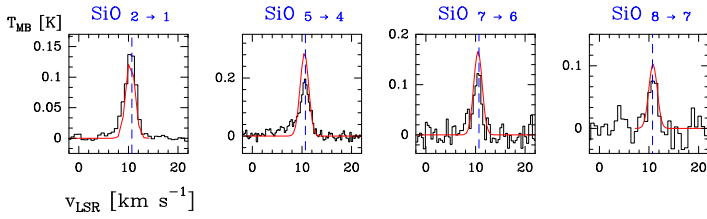


Figura 6.8: Ejemplos de líneas detectadas de SiO.

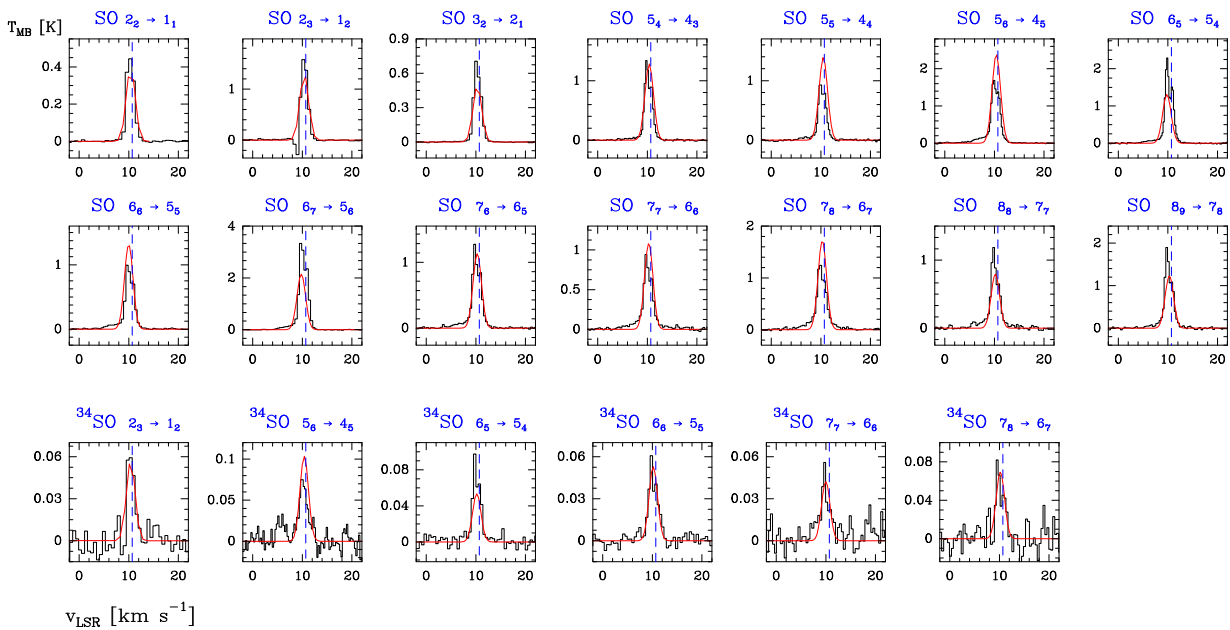


Figura 6.9: Líneas detectadas de SO y de sus isotopólogos.

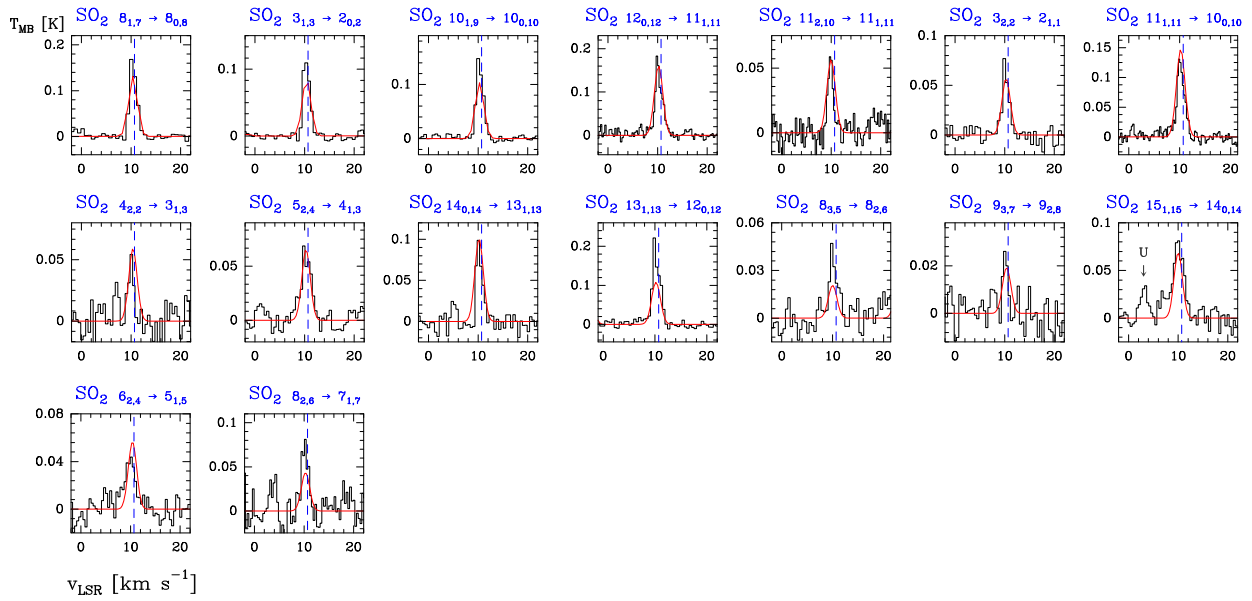


Figura 6.10: Ejemplos de líneas detectadas de SO_2 .

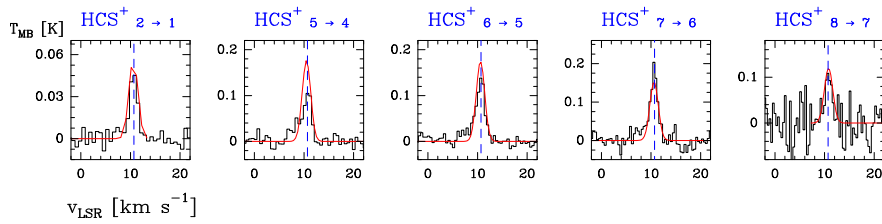


Figura 6.11: Líneas detectadas de HCS^+ .

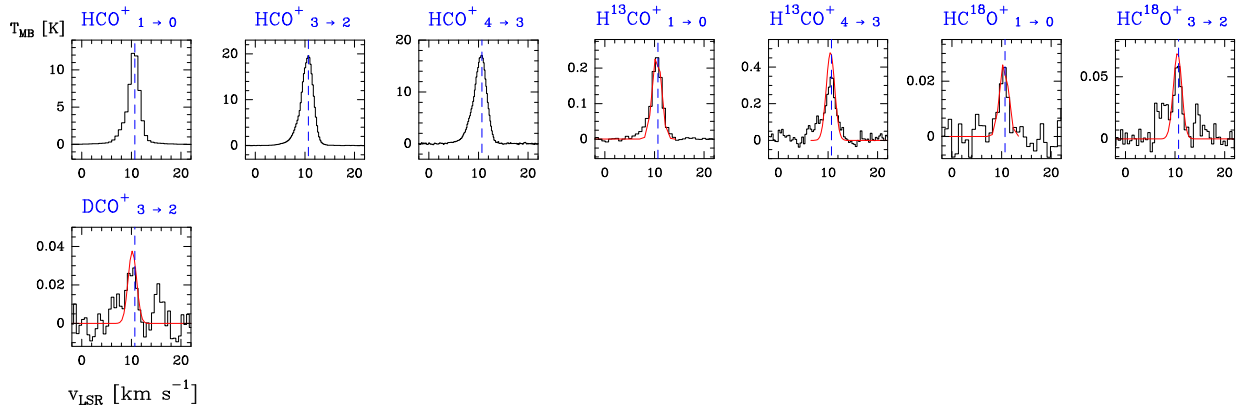


Figura 6.12: Líneas detectadas de HCO^+ y de sus isotopólogos.

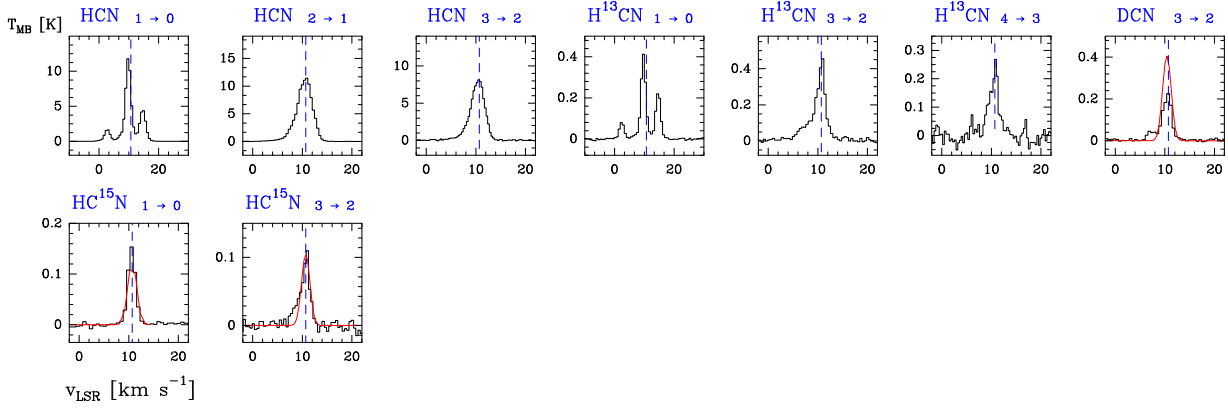


Figura 6.13: Líneas detectadas de HCN y de sus isotopólogos.

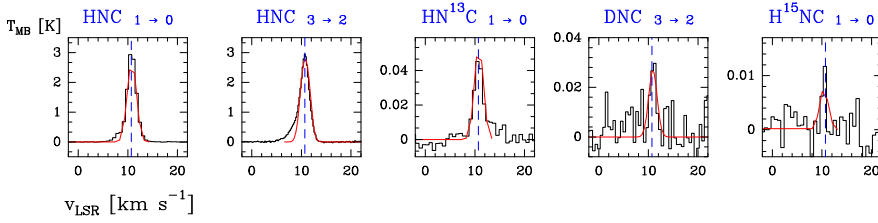


Figura 6.14: Líneas detectadas de HNC y de sus isotopólogos.

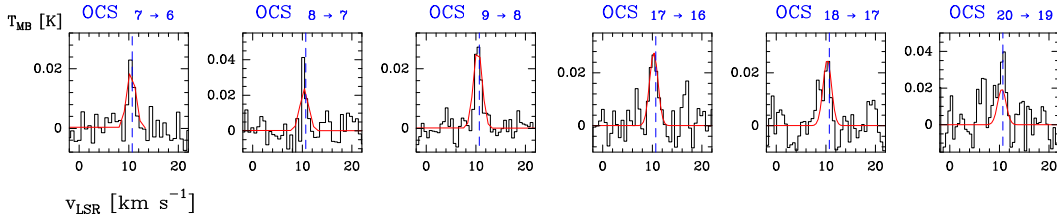


Figura 6.15: Líneas detectadas de OCS.

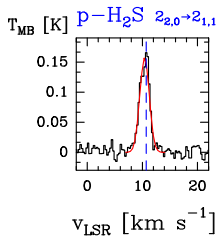


Figura 6.16: Líneas detectadas de H₂S.

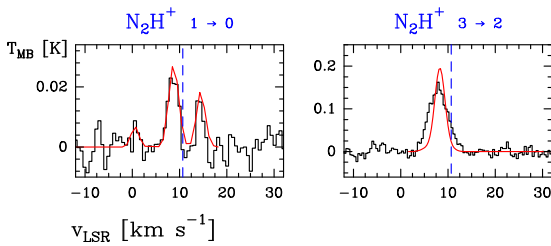


Figura 6.17: Líneas detectadas de N₂H⁺.

6.3. Parámetros espectroscópicos y observacionales

Tabla 6.3: Parámetros de línea de la molécula CO y de sus isotopólogos.

Species	Transition	Frequency	E_u/k	A_{ul}	S_{ul}	g_u	$\int T_{MB} dv$	v_{LSR}	Δv	T_{MB}	S/N
	$J_u \rightarrow J_l$	[MHz]	[K]	[s ⁻¹]			[K km s ⁻¹]	[km s ⁻¹]	[km s ⁻¹]	[K]	
CO	1 \rightarrow 0	115271.202 ^F	5.5	7.21×10^{-8}	1	3	411(<1)	10.5(<0.1)	3.5(<0.1)	110	7000
	2 \rightarrow 1	230537.999 ^F	16.6	6.92×10^{-7}	2	5	382(<1)	10.2(<0.1)	4.2(<0.1)	132	8000
	3 \rightarrow 2	345795.990 ^F	33.2	2.50×10^{-6}	3	7	714(<1)	10.1(<0.1)	4.3(<0.1)	155	5000
¹³ CO	1 \rightarrow 0	110201.354 ^F	5.3	6.34×10^{-8}	1	3	31(<1)	10.7(<0.1)	1.6(<0.1)	18	3000
	2 \rightarrow 1	220398.684 ^F	15.9	6.08×10^{-7}	2	5	76(<1)	10.6(<0.1)	2.0(<0.1)	35	3500
	3 \rightarrow 2	330587.964 ^F	31.7	2.20×10^{-6}	3	7	148(<1)	10.4(<0.1)	2.4(<0.1)	58	1300
C ¹⁸ O	1 \rightarrow 0	109782.176 ^F	5.3	6.26×10^{-8}	1	3	2(<1)	10.7(<0.1)	1.4(<0.1)	2	250
	2 \rightarrow 1	219560.358 ^F	15.8	6.01×10^{-7}	2	5	6(<1)	10.6(<0.1)	1.6(<0.1)	4	300
	3 \rightarrow 2	329330.552 ^F	31.6	2.17×10^{-6}	3	7	15(<1)	10.4(<0.1)	2.0(<0.1)	7	400
C ¹⁷ O	1,3/2 \rightarrow 0,5/2	112358.795 ^F	5.4	6.67×10^{-8}	1.3	4	> 0.4(<0.1)	10.7(<0.1)	1.5(<0.1)	0.2	40
	1,7/2 \rightarrow 0,5/2	112358.992 ^F	5.4	6.67×10^{-8}	2.7	8					
	1,5/2 \rightarrow 0,5/2	112360.001 ^F	5.4	6.67×10^{-8}	2	6	0.2(<0.1)	10.7(<0.1)	1.4(<0.1)	0.1	25
	2 \rightarrow 1	224714.390 ^F	16.2	6.45×10^{-7}	2	5	2.1(<0.1)	10.6(<0.1)	2.3(<0.1)	0.9	100
	3 \rightarrow 2	337061.124 ^F	32.4	2.33×10^{-6}	3	7	4.5(0.1)	10.5(<0.1)	2.2(<0.1)	1.9	100
¹³ C ¹⁸ O	1 \rightarrow 0	104711.396 ^F	5.0	5.43×10^{-8}	1	3	0.03(<0.01)	10.9(0.2)	1.7(0.3)	0.02	4
	2 \rightarrow 1	209419.159 ^F	15.1	5.22×10^{-7}	2	5	0.09(<0.01)	10.7(<0.1)	1.7(0.2)	0.05	8
¹³ C ¹⁷ O	2 \rightarrow 1	214574.080 ^F	15.4	5.61×10^{-7}	2	5	0.01(<0.01)	10.6(0.1)	0.6(0.3)	0.02*	3

Notas. Ajuste de todas las líneas rotacionales presentadas en Rosenblum et al. 1958, Winnewisser et al. 1985, Bogey et al. 1986, Nolt et al. 1987, Varberg et al. 1992, Belov et al. 1992, Mader et al. 1996, Winnewisser et al. 1997, Gendriesch et al. 2009 y Pearson et al. 2011.

Tabla 6.4: Parámetros de línea de la molécula CN y de sus isotopólogos.

Species, Transition	Frequency	E_u/k	A_{ul}	S_{ul}	g_u	$\int T_{MB} dv$	v_{LSR}	Δv	T_{MB}	S/N
	[MHz]	[K]	[s ⁻¹]			[K km s ⁻¹]	[km s ⁻¹]	[km s ⁻¹]	[K]	
CN, $(N, J, F)_u \rightarrow (N, J, F)_l$										
1,1/2,1/2 \rightarrow 0,1/2,1/2	113123.370 ^F	5.4	1.29×10^{-6}	0.07	2	0.58(0.01)	10.8(<0.1)	2.1(<0.1)	0.26	38
1,1/2,1/2 \rightarrow 0,1/2,3/2	113144.157 ^F	5.4	1.05×10^{-5}	0.59	2	4.58(0.02)	10.9(<0.1)	2.1(<0.1)	2.08	280
1,1/2,3/2 \rightarrow 0,1/2,1/2	113170.492 ^F	5.4	5.15×10^{-6}	0.58	4	4.69(0.02)	10.8(<0.1)	2.1(<0.1)	2.12	280
1,1/2,3/2 \rightarrow 0,1/2,3/2	113191.279 ^F	5.4	6.68×10^{-6}	0.75	4	5.95(0.03)	10.8(<0.1)	2.1(<0.1)	2.71	350
1,3/2,3/2 \rightarrow 0,1/2,1/2	113488.120 ^F	5.4	6.74×10^{-6}	0.75	4	5.61(0.11)	10.9(<0.1)	2.0(<0.1)	2.57	360
1,3/2,5/2 \rightarrow 0,1/2,3/2	113490.970 ^F	5.4	1.19×10^{-5}	2.00	6	16.68(0.08)	10.9(<0.1)	2.1(<0.1)	7.55	1000
1,3/2,1/2 \rightarrow 0,1/2,1/2	113499.644 ^F	5.4	1.06×10^{-5}	0.59	2	4.13(0.03)	10.9(<0.1)	2.1(<0.1)	1.89	260
1,3/2,3/2 \rightarrow 0,1/2,3/2	113508.907 ^F	5.4	5.19×10^{-6}	0.58	4	4.27(0.03)	10.8(<0.1)	2.1(<0.1)	1.94	260
1,3/2,1/2 \rightarrow 0,1/2,3/2	113520.432 ^F	5.4	1.30×10^{-6}	0.07	2	0.49(0.01)	10.9(<0.1)	1.9(<0.1)	0.24	33
2,3/2,1/2 \rightarrow 1,3/2,1/2	226287.419 ^F	16.3	1.03×10^{-5}	0.07	2	0.49(0.02)	10.8(<0.1)	2.2(0.1)	0.21	14
2,3/2,1/2 \rightarrow 1,3/2,3/2	226298.943 ^F	16.3	8.23×10^{-6}	0.06	2	0.35(0.02)	10.8(<0.1)	1.9(0.1)	0.18	13
2,3/2,3/2 \rightarrow 1,3/2,1/2	226303.037 ^F	16.3	4.17×10^{-6}	0.06	4	0.42(0.02)	10.8(<0.1)	2.1(0.1)	0.19	13

Notas. Frecuencias, E_u/k , A_{ul} , S_{ul} , y g_u del catálogo CDMS.

Tabla 6.4: Continuación.

Species, Transition	Frequency [MHz]	E_u/k [K]	A_{ul} [s ⁻¹]	S_{ul}	g_u	$\int T_{MB} dv$ [K km s ⁻¹]	v_{LSR} [km s ⁻¹]	Δv [km s ⁻¹]	T_{MB} [K]	S/N
2,3/2,3/2 \rightarrow 1,3/2,3/2	226314.540 ^F	16.3	9.90×10^{-6}	0.14	4	0.85(0.02)	10.8(<0.1)	1.9(0.1)	0.41	25
2,3/2,3/2 \rightarrow 1,3/2,5/2	226332.499 ^F	16.3	4.56×10^{-6}	0.06	4	0.44(0.02)	10.9(<0.1)	2.1(0.1)	0.20	14
2,3/2,5/2 \rightarrow 1,3/2,3/2	226341.930 ^F	16.3	3.16×10^{-6}	0.07	6	0.49(0.02)	10.7(<0.1)	2.0(0.1)	0.24	15
2,3/2,5/2 \rightarrow 1,3/2,5/2	226359.871 ^F	16.3	1.61×10^{-5}	0.34	6	2.41(0.03)	10.8(<0.1)	2.1(<0.1)	1.08	65
2,3/2,1/2 \rightarrow 1,1/2,3/2	226616.571 ^F	16.3	1.07×10^{-5}	0.08	2	0.45(0.02)	10.7(<0.1)	2.1(0.1)	0.21	14
2,3/2,3/2 \rightarrow 1,1/2,3/2	226632.190 ^F	16.3	4.26×10^{-5}	0.60	4	3.87(0.03)	10.8(<0.1)	2.1(<0.1)	1.72	107
2,3/2,5/2 \rightarrow 1,1/2,3/2	226659.558 ^F	16.3	9.47×10^{-5}	1.99	6	12.00(0.02)	10.8(<0.1)	2.2(<0.1)	5.13	310
2,3/2,1/2 \rightarrow 1,1/2,1/2	226663.693 ^F	16.3	8.47×10^{-5}	0.59	2	4.01(0.06)	10.7(<0.1)	2.5(<0.1)	1.50	100
2,3/2,3/2 \rightarrow 1,1/2,1/2	226679.311 ^F	16.3	5.27×10^{-5}	0.74	4	4.58(0.03)	10.8(<0.1)	2.1(<0.1)	2.05	130
2,5/2,5/2 \rightarrow 1,3/2,3/2	226874.191 ^F	16.3	9.62×10^{-5}	2.02	6					
2,5/2,7/2 \rightarrow 1,3/2,5/2	226874.781 ^F	16.3	1.14×10^{-4}	3.20	8	> 36.53(0.04)	10.8(<0.1)	3.3(<0.1)	10.34	606
2,5/2,3/2 \rightarrow 1,3/2,1/2	226875.896 ^F	16.3	8.59×10^{-5}	1.20	4					
2,5/2,3/2 \rightarrow 1,3/2,3/2	226887.420 ^F	16.3	2.73×10^{-5}	0.38	4	2.41(0.03)	10.8(<0.1)	2.1(<0.1)	1.10	68
2,5/2,5/2 \rightarrow 1,3/2,5/2	226892.128 ^F	16.3	1.81×10^{-5}	0.38	6	2.95(0.04)	10.8(<0.1)	2.2(<0.1)	1.26	81
2,5/2,3/2 \rightarrow 1,3/2,5/2	226905.357 ^F	16.3	1.13×10^{-6}	0.02	4	0.09(0.01)	10.6(0.1)	1.5(0.3)	0.06	4
3,5/2,3/2 \rightarrow 2,5/2,3/2	339446.777 ^F	32.6	2.26×10^{-5}	0.09	4	0.32(0.05)	10.7(0.1)	1.6(0.3)	0.19	6
3,5/2,3/2 \rightarrow 2,5/2,5/2	339459.996 ^F	32.6	4.33×10^{-6}	0.02	4	0.06(0.02)	11.1(0.2)	0.3(0.1)	0.19	4
3,5/2,5/2 \rightarrow 2,5/2,5/2	339475.904 ^F	32.6	2.12×10^{-5}	0.13	6	0.48(0.06)	10.8(0.1)	2.1(0.3)	0.21	7
3,5/2,7/2 \rightarrow 2,5/2,7/2	339516.635 ^F	32.6	2.54×10^{-5}	0.21	8	0.90(0.05)	10.8(<0.1)	1.8(0.1)	0.47	12
3,5/2,5/2 \rightarrow 2,3/2,5/2	340008.126 ^F	32.6	6.20×10^{-5}	0.39	6	1.44(0.06)	10.7(<0.1)	2.0(0.1)	0.69	17
3,5/2,3/2 \rightarrow 2,3/2,3/2	340019.626 ^F	32.6	9.27×10^{-5}	0.39	4	1.49(0.08)	10.6(<0.1)	2.1(0.1)	0.67	17
3,5/2,7/2 \rightarrow 2,3/2,5/2	340031.549 ^F	32.6	3.85×10^{-4}	3.20	8	10.04(0.10)	10.8(<0.1)	2.1(<0.1)	4.54	100
3,5/2,3/2 \rightarrow 2,3/2,1/2	340035.408 ^F	32.6	2.89×10^{-4}	1.20	4					
3,5/2,5/2 \rightarrow 2,3/2,3/2	340035.408 ^F	32.6	3.23×10^{-4}	2.01	6	> 11.19(0.11)	10.8(<0.1)	2.4(<0.1)	4.36	100
3,7/2,7/2 \rightarrow 2,5/2,5/2	340247.770 ^F	32.7	3.80×10^{-4}	3.15	8					
3,7/2,9/2 \rightarrow 2,5/2,7/2	340247.770 ^F	32.7	4.13×10^{-4}	4.29	10	> 27.38(0.09)	10.7(<0.1)	2.8(<0.1)	9.23	200
3,7/2,5/2 \rightarrow 2,5/2,3/2	340248.544 ^F	32.7	3.67×10^{-4}	2.29	6					
3,7/2,5/2 \rightarrow 2,5/2,5/2	340261.773 ^F	32.7	4.48×10^{-5}	0.28	6	1.00(0.08)	10.8(<0.1)	1.6(0.1)	0.57	14
3,7/2,7/2 \rightarrow 2,5/2,7/2	340264.949 ^F	32.7	3.35×10^{-5}	0.28	8	1.55(0.09)	10.8(<0.1)	2.2(0.2)	0.66	18
¹³ CN, $(N, J, f, F)_u \rightarrow (N, J, f, F)_l$										
1,1/2,0,1 \rightarrow 0,1/2,1,2	108426.889 ^F	5.2	1.88×10^{-5}	0.60	1	26.7(6.0)	11.0(0.2)	1.8(0.5)	13.9	4
1,1/2,1,0 \rightarrow 0,1/2,0,1	108631.121 ^F	5.2	3.19×10^{-6}	0.31	3	11.9(3.6)	10.3(0.2)	0.9(0.4)	12.0	3
1,1/2,1,1 \rightarrow 0,1/2,0,1	108636.923 ^F	5.2	9.61×10^{-6}	0.92	3	45.7(7.2)	10.6(0.2)	2.4(0.4)	17.5	5
1,3/2,1,1 \rightarrow 0,1/2,1,0	108638.212 ^F	5.2	3.59×10^{-6}	0.34	3	15.9(4.8)	10.8(0.1)	1.0(0.4)	14.5	4
1,3/2,1,2 \rightarrow 0,1/2,1,1	108643.590 ^F	5.2	4.26×10^{-6}	0.41	3	21.9(6.0)	10.5(0.2)	1.3(0.5)	15.3	5
1,3/2,1,0 \rightarrow 0,1/2,1,1	108644.346 ^F	5.2	3.19×10^{-6}	0.31	3	20.7(8.5)	10.3(0.32)	2.1(1.1)	9.2	3
1,3/2,1,1 \rightarrow 0,1/2,1,1	108645.064 ^F	5.2	2.74×10^{-6}	0.26	3	12.5(14.5)	10.5(0.9)	1.9(2.6)	6.1	2
1,1/2,1,2 \rightarrow 0,1/2,0,1	108651.297 ^F	5.2	1.63×10^{-5}	1.56	3	84.7(6.0)	10.9(0.1)	2.0(0.2)	40.3	11
1,3/2,1,2 \rightarrow 0,1/2,1,2	108657.646 ^F	5.2	1.20×10^{-5}	1.15	3	53.7(6.0)	11.0(0.1)	1.9(0.3)	26.8	7
1,3/2,1,1 \rightarrow 0,1/2,1,2	108658.948 ^F	5.2	3.33×10^{-6}	0.39	3	8.9(6.0)	10.9(0.1)	0.5(0.4)	15.4	2
1,3/2,2,3 \rightarrow 0,1/2,1,2	108780.201 ^F	5.2	1.47×10^{-5}	2.33	5	137.1(7.2)	10.8(<0.1)	2.4(0.1)	52.5	16
1,3/2,2,2 \rightarrow 0,1/2,1,1	108782.374 ^F	5.2	7.75×10^{-6}	1.23	5	70.6(7.2)	10.7(0.1)	2.4(0.3)	27.5	10
1,3/2,2,1 \rightarrow 0,1/2,1,0	108786.982 ^F	5.2	3.43×10^{-6}	0.54	5	20.6(6.0)	10.7(0.2)	1.7(0.6)	11.1	4
1,3/2,2,1 \rightarrow 0,1/2,1,1	108793.753 ^F	5.2	2.68×10^{-6}	0.43	5	8.4(4.8)	10.8(0.3)	0.6(0.5)	13.3	5
1,3/2,1,2 \rightarrow 0,1/2,0,1	109217.567 ^F	5.2	1.15×10^{-6}	0.11	3	10.7(3.6)	10.8(0.3)	1.5(0.4)	6.9	3
2,3/2,2,1 \rightarrow 1,1/2,1,0	217296.605 ^F	15.6	3.18×10^{-5}	0.63	5	22.7(10.4)	11.0(0.1)	0.6(0.4)	38.3	4

Tabla 6.4: Continuación.

Species, Transition	Frequency [MHz]	E_u/k [K]	A_{ul} [s ⁻¹]	S_{ul}	g_u	$\int T_{MB} dv$ [mK km s ⁻¹]	v_{LSR} [km s ⁻¹]	Δv [km s ⁻¹]	T_{MB} [mK]	S/N
2,3/2,2,2 \rightarrow 1,1/2,1,1	217301.175 ^F	15.6	7.16×10^{-5}	1.43	5	36.9(8.9)	10.9(0.1)	0.8(0.2)	43.2	5
2,3/2,2,3 \rightarrow 1,1/2,1,2	217303.191 ^F	15.6	1.34×10^{-4}	2.68	5	164.1(16.3)	10.9(<0.1)	2.4(0.3)	63.3	7
2,3/2,1,2 \rightarrow 1,1/2,0,1	217304.927 ^F	15.6	8.86×10^{-5}	1.06	3	30.2(11.9)	10.7(0.2)	0.7(0.4)	37.8	3
2,5/2,2,3 \rightarrow 1,3/2,1,2	217428.563 ^F	15.6	1.07×10^{-4}	2.13	5	121.8(16.3)	10.8(0.2)	2.6(0.4)	43.5	6
2,5/2,2,2 \rightarrow 1,3/2,1,1	217436.350 ^F	15.6	5.89×10^{-5}	1.17	5	40.5(17.8)	11.1(0.3)	1.7(0.8)	22.6	2
2,5/2,2,2 \rightarrow 1,3/2,1,2	217437.702 ^F	15.6	1.76×10^{-5}	0.35	5	23.4(14.8)	11.2(0.2)	0.8(0.6)	26.3	3
2,5/2,2,1 \rightarrow 1,3/2,1,1	217443.722 ^F	15.6	1.85×10^{-5}	0.37	5	46.3(13.3)	10.7(0.2)	1.4(0.4)	30.8	3
2,5/2,2,1 \rightarrow 1,3/2,1,0	217443.722 ^F	15.6	2.61×10^{-5}	0.52	5					
2,5/2,3,4 \rightarrow 1,3/2,2,3	217467.150 ^F	15.6	1.29×10^{-4}	3.60	7	262.8(19.3)	10.9(0.1)	2.1(0.2)	114.9	13
2,5/2,3,3 \rightarrow 1,3/2,2,2	217467.150 ^F	15.6	8.92×10^{-5}	2.48	7					
2,5/2,3,2 \rightarrow 1,3/2,2,1	217469.151 ^F	15.6	6.02×10^{-5}	1.67	7	98.7(16.3)	10.7(0.2)	1.8(0.3)	50.5	5
C¹⁵N, (N,J,F)_u \rightarrow (N,J,F)_l										
1,1/2,1 \rightarrow 0,1/2,1	109689.610 ^F	5.3	7.10×10^{-6}	0.66	3	19.6(6.0)	10.6(0.2)	1.1(0.4)	16.0	4
1,3/2,1 \rightarrow 0,1/2,0	110023.540 ^F	5.3	7.16×10^{-6}	0.66	3	18.1(6.1)	10.6(0.3)	1.5(0.4)	11.3	3
1,3/2,2 \rightarrow 0,1/2,1	110024.590 ^F	5.3	1.09×10^{-5}	1.67	5	49.5(6.1)	10.7(0.1)	1.5(0.2)	31.0	8
2,5/2,2 \rightarrow 1,3/2,1	219934.040 ^F	15.8	9.36×10^{-5}	1.80	5	103.4(13.4)	10.8(0.2)	2.4(0.4)	40.9	5
2,5/2,3 \rightarrow 1,3/2,2	219934.820 ^F	15.8	1.04×10^{-4}	2.80	7					
3,7/2,3 \rightarrow 2,5/2,2	329837.133 ^F	31.7	3.58×10^{-4}	2.86	7	46.9(19.9)	10.5(0.1)	0.3(0.2)	149.4	3
3,7/2,4 \rightarrow 2,5/2,3	329837.650 ^F	31.7	3.76×10^{-4}	3.86	9					

Tabla 6.5: Parámetros de línea de la molécula NO $^2\Pi_{1/2} \rightarrow ^2\Pi_{1/2}$.

Transition	Frequency [MHz]	E_u/k [K]	A_{ul} [s ⁻¹]	S_{ul}	g_u	$\int T_{MB} dv$ [mK km s ⁻¹]	v_{LSR} [km s ⁻¹]	Δv [km s ⁻¹]	T_{MB} [mK]	S/N
$(J^P, F)_u \rightarrow (J^P, F)_l$										
(3/2 ⁻ , 5/2) \rightarrow (1/2 ⁺ , 3/2)	150176.457 ^W	7.2	3.31×10^{-7}	2.0	6	130(35)	—	—	—	3
(3/2 ⁺ , 5/2) \rightarrow (1/2 ⁻ , 3/2)	150546.462 ^W	7.2	3.33×10^{-7}	2.0	6	56(31) ^a	—	—	—	2
(5/2 ⁺ , 7/2) \rightarrow (3/2 ⁻ , 5/2)	250436.842 ^F	19.2	1.84×10^{-6}	3.2	8	219(10)	10.3(<0.1)	2.0(0.1)	105	27
(5/2 ⁺ , 5/2) \rightarrow (3/2 ⁻ , 3/2)	250440.653 ^F	19.2	1.55×10^{-6}	2.0	6	173(10)	10.5(<0.1)	2.0(0.1)	84	19
(5/2 ⁺ , 3/2) \rightarrow (3/2 ⁻ , 1/2)	250448.526 ^F	19.2	1.38×10^{-6}	1.2	4	78(8)	10.4(0.1)	1.5(0.2)	50	12
(5/2 ⁺ , 3/2) \rightarrow (3/2 ⁻ , 3/2)	250475.419 ^F	19.2	4.42×10^{-7}	0.4	4	25(13)	11.0(0.2)	0.7(0.4)	32	7
(5/2 ⁻ , 5/2) \rightarrow (3/2 ⁺ , 5/2)	250708.242 ^F	19.3	2.96×10^{-7}	0.4	6	45(10)	10.7(0.2)	1.7(0.5)	25	8
(5/2 ⁻ , 3/2) \rightarrow (3/2 ⁺ , 3/2)	250753.134 ^F	19.3	4.44×10^{-7}	0.4	4	34(8)	10.4(0.1)	1.1(0.3)	29	7
(5/2 ⁻ , 7/2) \rightarrow (3/2 ⁺ , 5/2)	250796.423 ^F	19.3	1.85×10^{-6}	3.2	8	200(10)	10.4(<0.1)	1.8(0.1)	105	23
(5/2 ⁻ , 5/2) \rightarrow (3/2 ⁺ , 3/2)	250815.610 ^F	19.3	1.55×10^{-6}	2.0	6	201(13)	10.6(0.1)	2.9(0.2)	65	17
(5/2 ⁻ , 3/2) \rightarrow (3/2 ⁺ , 1/2)	250816.930 ^F	19.3	1.39×10^{-6}	1.2	4					

Notas. Frecuencias y E_u/k de Varberg et al. 1999, S_{ul} del catálogo JPL. ^a Mal ajustado.

Tabla 6.6: Parámetros de línea de la molécula CS y de sus isotopólogos.

Species	Transition	Frequency	E_u/k	A_{ul}	S_{ul}	g_u	$\int T_{MB} dv$	v_{LSR}	Δv	T_{MB}	S/N
	$J_u \rightarrow J_l$	[MHz]	[K]	[s ⁻¹]			[K km s ⁻¹]	[km s ⁻¹]	[km s ⁻¹]	[K]	
CS	2 \rightarrow 1	97980.953 ^F	7.1	1.68×10^{-5}	2	5	10.04(0.04)	10.7(<0.1)	1.6 (<0.1)	5.87	900
	3 \rightarrow 2	146969.026 ^W	14.1	6.07×10^{-5}	3	7	13.60(0.03)	—	—	—	250
	5 \rightarrow 4	244935.555 ^F	35.3	2.98×10^{-4}	5	11	11.18(0.09)	10.8(<0.1)	1.6 (<0.1)	6.76	600
	6 \rightarrow 5	293912.089 ^F	49.4	5.23×10^{-4}	6	13	10.74(0.09)	10.7(<0.1)	1.6 (<0.1)	6.27	450
	7 \rightarrow 6	342882.854 ^F	65.8	8.40×10^{-4}	7	15	7.28(0.13)	10.7(<0.1)	1.5 (<0.1)	4.42	100
¹³ CS	2 \rightarrow 1	92494.270 ^F	6.7	1.41×10^{-5}	2	5	0.20(0.01)	10.6(<0.1)	1.5(<0.1)	0.12	22
	3 \rightarrow 2	138739.264 ^W	13.3	5.11×10^{-5}	3	7	0.42(0.02)	—	—	—	15
	5 \rightarrow 4	231220.684 ^F	33.3	2.51×10^{-4}	5	11	0.26(0.02)	10.8(<0.1)	0.7(<0.1)	0.35	19
	6 \rightarrow 5	277455.398 ^F	46.6	4.40×10^{-4}	6	13	0.29(0.01)	10.8(<0.1)	0.7(<0.1)	0.42	31
C ³⁴ S	2 \rightarrow 1	96412.952 ^F	6.9	1.60×10^{-5}	2	5	0.73(0.01)	10.6(<0.1)	1.4 (<0.1)	0.48	60
	3 \rightarrow 2	144617.101 ^W	13.9	5.78×10^{-5}	3	7	1.14(0.02)	—	—	—	43
	5 \rightarrow 4	241016.089 ^F	34.7	2.84×10^{-4}	5	11	1.04(0.02)	10.9(<0.1)	0.7 (<0.1)	1.35	80
	7 \rightarrow 6	337396.458 ^F	64.8	8.00×10^{-4}	7	15	0.51(0.04)	10.9(<0.1)	0.9 (0.1)	0.51	12
C ³³ S	2 \rightarrow 1	97172.064 ^F	7.0	1.64×10^{-5}	2	5	0.068(0.009)	11.1 (0.1)	1.2(0.2)	0.053	8
	3 \rightarrow 2	145755.731 ^W	14.0	5.92×10^{-5}	3	7	0.30(0.03)	—	—	—	12
	5 \rightarrow 4	242913.609 ^F	35.0	2.91×10^{-4}	5	11	0.22(0.01)	10.8 (<0.1)	0.7(<0.1)	0.32	21
	6 \rightarrow 5	291485.929 ^F	49.0	5.10×10^{-4}	6	13	0.19(0.01)	10.9 (<0.1)	0.7(<0.1)	0.24	27
	7 \rightarrow 6	340052.574 ^F	65.3	8.19×10^{-4}	7	15	0.16(0.05)	11.2 (0.3)	1.2(0.4)	0.13	3
¹³ C ³⁴ S	2 \rightarrow 1	90925.996 ^F	6.5	1.34×10^{-5}	2	5	0.016(0.002)	11.2(0.3)	1.5(0.3)	0.010	2

Notas. Ajuste de todas las líneas rotacionales presentadas en Kim et al. 2003 y Ahrens et al. 1999, y los datos de laboratorio de Bogey et al. 1982 y Gottlieb et al. 2003.

Tabla 6.7: Parámetros de línea de la molécula NS ($^2\Pi_{1/2} \rightarrow ^2\Pi_{1/2}$).

Transition	Frequency	E_u/k	A_{ul}	S_{ul}	g_u	$\int T_{MB} dv$	v_{LSR}	Δv	T_{MB}	S/N
$(J^p, F)_u \rightarrow (J^p, F)_l$	[MHz]	[K]	[s ⁻¹]			[mK km s ⁻¹]	[km s ⁻¹]	[km s ⁻¹]	[mK]	
5/2 ⁺ , 7/2 \rightarrow 3/2 ⁻ , 5/2	115153.935 ^F	8.8	2.33×10^{-5}	3.20	8	158.0(14.6)	10.9(0.1)	1.8(0.2)	82.0	8
5/2 ⁺ , 5/2 \rightarrow 3/2 ⁻ , 3/2	115156.812 ^F	8.8	1.96×10^{-5}	2.02	6	111.3(14.6)	10.8(0.1)	1.3(0.2)	83.2	10
5/2 ⁺ , 3/2 \rightarrow 3/2 ⁻ , 1/2	115162.982 ^F	8.8	1.75×10^{-5}	1.20	4	39.7(11.0)	10.9(0.1)	0.8(0.4)	45.7	4
5/2 ⁻ , 7/2 \rightarrow 3/2 ⁺ , 5/2	115556.253 ^F	8.9	2.35×10^{-5}	3.20	8	121.5(20.7)	10.6(0.1)	1.4(0.3)	82.9	5
5/2 ⁻ , 5/2 \rightarrow 3/2 ⁺ , 3/2	115570.763 ^F	8.9	1.98×10^{-5}	2.02	6	145.0(22.0)	10.6(0.1)	1.6(0.3)	82.6	5
5/2 ⁻ , 3/2 \rightarrow 3/2 ⁺ , 1/2	115571.954 ^F	8.9	1.77×10^{-5}	1.20	4	36.6(12.2)	10.7(0.3)	1.0(0.1)	34.4	2
7/2 ⁻ , 9/2 \rightarrow 5/2 ⁺ , 7/2	161297.246 ^W	16.6	6.87×10^{-5}	4.29	10	307.2(43.3)	—	—	—	9
7/2 ⁻ , 7/2 \rightarrow 5/2 ⁺ , 5/2	161298.411 ^W	16.6	6.30×10^{-5}	3.15	8					
7/2 ⁻ , 5/2 \rightarrow 5/2 ⁺ , 3/2	161301.747 ^W	16.6	6.11×10^{-5}	2.29	6	45.2(44.7)	—	—	—	2
7/2 ⁺ , 9/2 \rightarrow 5/2 ⁻ , 7/2	161697.257 ^W	16.7	6.92×10^{-5}	4.29	10	79.0(34.2)	—	—	—	4
7/2 ⁺ , 7/2 \rightarrow 5/2 ⁻ , 5/2	161703.404 ^W	16.7	6.35×10^{-5}	3.15	8	107.8(31.5)	—	—	—	4
7/2 ⁺ , 5/2 \rightarrow 5/2 ⁻ , 3/2	161703.987 ^W	16.7	6.15×10^{-5}	2.29	6					
9/2 ⁺ , 11/2 \rightarrow 7/2 ⁻ , 9/2	207436.051 ^F	26.5	1.51×10^{-4}	5.33	12	251.6(11.6)	10.7(<0.1)	2.2(0.1)	108.0	15
9/2 ⁺ , 9/2 \rightarrow 7/2 ⁻ , 7/2	207436.636 ^F	26.5	1.44×10^{-4}	4.22	10					

Notas. Frecuencias, E_u/k , A_{ul} , S_{ul} , y g_u del catálogo CDMS.

Tabla 6.7: Continuación.

Transition (J^P, F) _u → (J^P, F) _l	Frequency [MHz]	E_u/k [K]	A_{ul} [s ⁻¹]	S_{ul}	g_u	$\int T_{MB} dv$ [mK km s ⁻¹]	v_{LSR} [km s ⁻¹]	Δv [km s ⁻¹]	T_{MB} [mK]	S/N
9/2 ⁺ , 7/2 → 7/2 ⁻ , 5/2	207438.692 ^F	26.5	1.42×10^{-4}	3.33	8	108.3(11.6)	10.6(0.1)	2.2(0.3)	46.3	6
9/2 ⁻ , 11/2 → 7/2 ⁺ , 9/2	207834.866 ^F	26.6	1.52×10^{-4}	5.33	12	143.9(10.1)	10.5(0.1)	2.0(0.2)	68.9	6
9/2 ⁻ , 9/2 → 7/2 ⁺ , 7/2	207838.365 ^F	26.6	1.45×10^{-4}	4.22	10	202.9(11.6)	10.5(<0.1)	2.2(0.1)	87.0	7
9/2 ⁻ , 7/2 → 7/2 ⁺ , 5/2	207838.365 ^F	26.6	1.43×10^{-4}	3.33	8					
11/2 ⁻ , 13/2 → 9/2 ⁺ , 11/2	253570.476 ^F	38.7	2.82×10^{-4}	6.36	14	289.6(11.5)	10.5(<0.1)	3.1(0.2)	86.8	11
11/2 ⁻ , 11/2 → 9/2 ⁺ , 9/2	253570.476 ^F	38.7	2.73×10^{-4}	5.27	12					
11/2 ⁻ , 9/2 → 9/2 ⁺ , 7/2	253572.148 ^F	38.7	2.71×10^{-4}	4.36	10	88.1(14.8)	10.8(0.1)	1.5(0.3)	55.2	6
11/2 ⁺ , 13/2 → 9/2 ⁻ , 11/2	253968.393 ^F	38.8	2.84×10^{-4}	6.36	14					
11/2 ⁺ , 11/2 → 9/2 ⁻ , 9/2	253970.581 ^F	38.8	2.74×10^{-4}	5.27	12	205.5(14.8)	10.5(0.1)	2.5(0.2)	76.3	7
11/2 ⁺ , 9/2 → 9/2 ⁻ , 7/2	253970.581 ^F	38.8	2.72×10^{-4}	4.36	10					
13/2 ⁺ , 15/2 → 11/2 ⁻ , 13/2	299699.781 ^F	53.1	4.74×10^{-4}	7.38	16	213.0(19.4)	10.6(0.1)	2.4(0.3)	84.1	6
13/2 ⁺ , 13/2 → 11/2 ⁻ , 11/2	299699.781 ^F	53.1	4.63×10^{-4}	6.31	14					
13/2 ⁺ , 11/2 → 11/2 ⁻ , 9/2	299700.901 ^F	53.1	4.60×10^{-4}	5.38	12	28.3(9.7)	10.8(0.1)	0.5(0.2)	51.9	2
13/2 ⁺ , 13/2 → 11/2 ⁻ , 13/2	299739.525 ^F	53.1	1.12×10^{-5}	0.15	14					
13/2 ⁻ , 15/2 → 11/2 ⁺ , 13/2	300097.098 ^F	53.2	4.75×10^{-4}	7.38	16	311.8(25.3)	10.4(0.1)	3.2(0.3)	91.6	6
13/2 ⁻ , 13/2 → 11/2 ⁺ , 11/2	300098.611 ^F	53.2	4.65×10^{-4}	6.31	14					
13/2 ⁻ , 11/2 → 11/2 ⁺ , 9/2	300098.611 ^F	53.2	4.62×10^{-4}	5.38	12	97.2(23.7)	10.7(0.1)	1.2(0.4)	77.0	4
15/2 ⁻ , 17/2 → 13/2 ⁺ , 14/2	345823.288 ^F	69.7	7.36×10^{-4}	8.40	18					
15/2 ⁻ , 15/2 → 13/2 ⁺ , 13/2	345823.288 ^F	69.7	7.23×10^{-4}	7.33	16	110.4(26.1)	10.2(0.3)	1.3(0.3)	79.7	5
15/2 ⁻ , 13/2 → 13/2 ⁺ , 11/2	345824.130 ^F	69.7	7.21×10^{-4}	6.40	14					
15/2 ⁺ , 17/2 → 13/2 ⁻ , 14/2	346220.137 ^F	69.8	7.39×10^{-4}	8.40	18	0.18(0.04)	10.8(0.19)	2.0(0.6)	0.08	5
15/2 ⁺ , 15/2 → 13/2 ⁻ , 13/2	346221.163 ^F	69.8	7.25×10^{-4}	7.33	16					
15/2 ⁺ , 13/2 → 13/2 ⁻ , 11/2	346221.163 ^F	69.8	7.23×10^{-4}	6.40	14					

Tabla 6.8: Parámetros de línea de la molécula SiO.

Transition $J_u \rightarrow J_l$	Frequency [MHz]	E_u/k [K]	A_{ul} [s ⁻¹]	S_{ul}	g_u	$\int T_{MB} dv$ [K km s ⁻¹]	v_{LSR} [km s ⁻¹]	Δv [km s ⁻¹]	T_{MB} [K]	S/N
2 → 1	86846.986 ^F	6.3	2.93×10^{-5}	2	5	0.40(<0.01)	10.4(<0.1)	2.8(<0.1)	0.14	38
3 → 2	130268.687 ^W	12.5	1.06×10^{-4}	3	7	0.55(0.07)	—	—	—	13
4 → 3	173688.237 ^W	20.8	2.60×10^{-4}	4	9	0.22(0.09)	—	—	—	3
5 → 4	217104.919 ^F	31.3	5.20×10^{-4}	5	11	0.48(0.02)	10.5(<0.1)	2.7(0.1)	0.17	18
6 → 5	260518.018 ^W	43.8	9.12×10^{-4}	6	13	0.61(0.06)	—	—	—	15
7 → 6	303926.814 ^F	58.4	1.46×10^{-3}	7	15	0.31(0.04)	10.5(0.14)	2.5(0.5)	0.11	7
8 → 7	347330.592 ^F	75.0	2.20×10^{-3}	8	17	0.18(0.04)	10.8(0.19)	2.0(0.6)	0.08	5

Notas. Ajuste de todas las líneas rotacionales presentadas en Torring et al. 1968, Mollaaghababa et al. 1991, Cho et al. 1998 y Sanz et al. 2003.

Tabla 6.9: Parámetros de línea de la molécula SO y de sus isotopólogos.

Species	Transition	Frequency	E_u/k	A_{ul}	S_{ul}	g_u	$\int T_{MB} dv$	v_{LSR}	Δv	T_{MB}	S/N
	$(N_J)_u \rightarrow (N_J)_l$	[MHz]	[K]	[s ⁻¹]			[mK km s ⁻¹]	[km s ⁻¹]	[km s ⁻¹]	[mK]	
SO	$2_2 \rightarrow 1_1$	86093.957 ^F	19.3	5.25×10^{-6}	1.50	5	910(10)	10.4(<0.1)	1.8(<0.1)	470	120
	$2_3 \rightarrow 1_2$	99299.886 ^F	9.2	1.13×10^{-5}	2.93	7	2610(10)	10.4(<0.1)	1.5(<0.1)	1690	150
	$5_4 \rightarrow 4_4$	100029.550 ^F	38.6	1.08×10^{-6}	0.36	9	150(10)	10.4(0.1)	1.5(0.2)	90	7
	$3_2 \rightarrow 2_1$	109252.181 ^F	21.1	1.08×10^{-5}	1.51	5	1250(10)	10.3(<0.1)	1.7(<0.1)	690	220
	$3_3 \rightarrow 2_2$	129138.901 ^W	25.5	2.25×10^{-5}	2.67	7	2390(50)	—	—	—	34
	$6_5 \rightarrow 5_5$	136634.660 ^W	50.7	1.75×10^{-6}	0.28	11	180(30)	—	—	—	5
	$3_4 \rightarrow 2_3$	138178.654 ^W	15.9	3.17×10^{-5}	3.94	9	4540(80)	—	—	—	82
	$4_3 \rightarrow 3_2$	158971.811 ^W	28.7	4.23×10^{-5}	2.69	7	1300(30)	—	—	—	63
	$4_4 \rightarrow 3_3$	172181.403 ^W	33.8	5.83×10^{-5}	3.75	9	2340(60)	—	—	—	40
	$5_4 \rightarrow 4_3$	206176.013 ^F	38.6	1.01×10^{-4}	3.78	9	2280(10)	10.4(<0.1)	1.8(<0.1)	1190	120
	$5_5 \rightarrow 4_4$	215220.650 ^F	44.1	1.19×10^{-4}	4.80	11	1790(10)	10.5(<0.1)	1.8(<0.1)	920	80
	$5_6 \rightarrow 4_5$	219949.389 ^F	35.0	1.34×10^{-4}	5.95	13	3420(30)	10.4(<0.1)	2.0(<0.1)	1620	125
	$2_1 \rightarrow 1_2$	236452.293 ^F	15.8	1.42×10^{-6}	0.01	3	70(20)	10.4(0.3)	2.2(0.5)	30	3
	$3_2 \rightarrow 2_3$	246404.588 ^F	21.1	1.01×10^{-6}	0.01	5	30(10)	11.0(0.6)	2.4(0.8)	10	2
	$6_5 \rightarrow 5_4$	251825.759 ^F	50.7	1.93×10^{-4}	4.84	11	2140(30)	9.8(<0.1)	0.9(<0.1)	2210	140
	$6_6 \rightarrow 5_5$	258255.826 ^F	56.5	2.12×10^{-4}	5.83	13	1140(30)	9.8(<0.1)	1.0(<0.1)	1090	120
	$6_7 \rightarrow 5_6$	261843.705 ^F	47.6	2.28×10^{-4}	6.95	15	3710(50)	9.8(<0.1)	0.9(<0.1)	3730	220
	$7_6 \rightarrow 6_5$	296550.053 ^F	64.9	3.23×10^{-4}	5.87	13	2230(40)	10.3(<0.1)	2.0(<0.1)	1290	50
	$7_7 \rightarrow 6_6$	301286.118 ^F	71.0	3.43×10^{-4}	6.86	15	1710(60)	10.3(<0.1)	2.1(0.1)	930	40
	$7_8 \rightarrow 6_7$	304077.858 ^F	62.1	3.61×10^{-4}	7.96	17	2620(60)	10.3(<0.1)	2.2(0.1)	1150	50
	$3_3 \rightarrow 2_3$	339341.458 ^F	25.5	1.46×10^{-5}	0.01	7	50(10)	10.6(0.1)	0.5(0.2)	90	2
	$8_7 \rightarrow 7_6$	340714.286 ^F	81.2	4.99×10^{-4}	6.89	15	1590(80)	10.3(<0.1)	2.1(0.1)	840	14
	$8_8 \rightarrow 7_7$	344310.713 ^F	87.5	5.19×10^{-4}	7.87	17	1940(50)	10.2(<0.1)	1.9(<0.1)	1200	40
	$8_9 \rightarrow 7_8$	346528.528 ^F	78.8	5.38×10^{-4}	8.96	19	2950(60)	10.3(<0.1)	1.8(<0.1)	1920	56
³⁴ SO	$2_2 \rightarrow 1_1$	84410.684 ^F	19.2	4.95×10^{-6}	1.50	5	41(7)	10.5(0.2)	1.8(0.3)	22	5
	$5_4 \rightarrow 4_4$	96781.825 ^F	38.1	9.86×10^{-7}	0.36	9	20(9)	10.3(0.3)	1.1(0.7)	17	2
	$2_3 \rightarrow 1_2$	97715.405 ^F	9.1	1.07×10^{-5}	2.93	7	112(12)	10.4(0.1)	1.6(0.2)	66	8
	$3_4 \rightarrow 2_3$	135775.651 ^W	15.6	3.00×10^{-5}	3.94	9	192(33)	—	—	—	5
	$4_3 \rightarrow 3_2$	155506.801 ^W	28.4	3.96×10^{-5}	2.69	7	167(42)	—	—	—	4
	$4_4 \rightarrow 3_3$	168815.110 ^W	33.4	5.50×10^{-5}	3.75	9	116(52)	—	—	—	3
	$5_5 \rightarrow 4_4$	211013.020 ^F	43.5	1.12×10^{-4}	4.80	11	80(9)	10.3(0.1)	1.8(0.2)	45	5
	$5_6 \rightarrow 4_5$	215839.917 ^F	34.4	1.26×10^{-4}	5.95	13	168(15)	10.4(0.1)	2.3(0.3)	68	7
	$6_5 \rightarrow 5_4$	246663.395 ^F	49.9	1.81×10^{-4}	4.83	11	155(11)	10.2(0.1)	1.8(0.1)	105	10
	$6_6 \rightarrow 5_5$	253207.017 ^F	55.7	2.00×10^{-4}	5.83	13	100(13)	10.2(0.1)	2.2(0.1)	65	12
	$6_7 \rightarrow 5_6$	256877.810 ^F	46.7	2.16×10^{-4}	6.95	15	120(18)	10.2(0.1)	1.8(0.2)	74	8
	$7_7 \rightarrow 6_6$	295396.320 ^F	69.9	3.23×10^{-4}	6.86	15	86(19)	9.8(0.1)	1.5(0.1)	54	6
	$7_8 \rightarrow 6_7$	298257.972 ^F	61.0	3.41×10^{-4}	7.96	17	133(17)	10.1(0.1)	2.1(0.2)	91	6

Notas. Ajuste de todas las líneas rotacionales presentadas en Powell et al. 1964, Winnewisser et al. 1964, Amano et al. 1967, Tiemann et al. 1974, Clark et al. 1976, Bogey et al. 1982b, Tiemann et al. 1982, Lovas et al. 1992, Cazzoli et al. 1994, Klaus et al. 1994, Klaus et al. 1996, Bogey et al. 1997, Hansen et al. 1998, Sanz et al. 2003 y Martin-Drumel et al. 2015

Tabla 6.10: Parámetros de línea de la molécula SO₂.

Transition (J_{K_a,K_c}) _u → (J_{K_a,K_c}) _l	Frequency [MHz]	E_u/k [K]	A_{ul} [s ⁻¹]	S_{ul}	g_u	$\int T_{MB} dv$ [mK km s ⁻¹]	v_{LSR} [km s ⁻¹]	Δv [km s ⁻¹]	T_{MB} [mK]	S/N
8 _{1,7} → 8 _{0,8}	83688.092 ^F	36.7	6.83×10^{-6}	6.38	17	303(10)	10.4(0.1)	1.7(0.1)	169	27
3 _{1,3} → 2 _{0,2}	104029.420 ^F	7.7	1.01×10^{-5}	2.01	7	196(6)	10.4(0.1)	1.6(0.1)	117	27
10 _{1,9} → 10 _{0,10}	104239.299 ^F	54.7	1.12×10^{-5}	6.70	21	252(6)	10.3(0.1)	1.7(0.1)	143	36
8 _{0,8} → 7 _{1,7}	116980.450 ^W	32.7	1.35×10^{-5}	4.60	17	440(155)	—	—	—	6
12 _{2,10} → 12 _{1,11}	128605.111 ^W	82.6	2.62×10^{-5}	9.90	25	120(62)	—	—	—	5
10 _{2,8} → 10 _{1,9}	129514.799 ^W	60.9	2.50×10^{-5}	7.79	21	210(64)	—	—	—	5
12 _{1,11} → 12 _{0,12}	131014.841 ^W	76.4	1.86×10^{-5}	6.64	25	150(42)	—	—	—	8
8 _{2,6} → 8 _{1,7}	134004.812 ^W	43.1	2.50×10^{-5}	5.69	17	188(25)	—	—	—	4
5 _{1,5} → 4 _{0,4}	135696.017 ^W	15.7	2.21×10^{-5}	3.13	11	333(45)	—	—	—	10
6 _{2,4} → 6 _{1,5}	140306.166 ^W	29.2	2.53×10^{-5}	3.83	13	213(20)	—	—	—	7
16 _{2,14} → 16 _{1,15}	143057.080 ^W	137.5	3.57×10^{-5}	12.97	33	76(13)	—	—	—	3
4 _{2,2} → 4 _{1,3}	146605.520 ^W	19.0	2.47×10^{-5}	2.27	9	51(33)	—	—	—	2
2 _{2,0} → 2 _{1,1}	151378.663 ^W	12.6	1.88×10^{-5}	0.87	5	109(32)	—	—	—	3
3 _{2,2} → 3 _{1,3}	158199.781 ^W	15.3	2.53×10^{-5}	1.44	7	59(22)	—	—	—	2
10 _{0,10} → 9 _{1,9}	160827.841 ^W	49.7	3.95×10^{-5}	6.43	21	462(38)	—	—	—	9
14 _{1,13} → 14 _{0,14}	163605.533 ^W	101.8	3.00×10^{-5}	6.41	29	93(20)	—	—	—	6
5 _{2,4} → 5 _{1,5}	165144.652 ^W	23.6	3.12×10^{-5}	2.46	11	199(54)	—	—	—	6
7 _{1,7} → 6 _{0,6}	165225.452 ^W	27.1	4.14×10^{-5}	4.43	15	346(38)	—	—	—	8
7 _{2,6} → 7 _{1,7}	175275.722 ^W	35.5	3.68×10^{-5}	3.30	15	255(252)	—	—	—	4
12 _{0,12} → 11 _{1,11}	203391.484 ^F	70.1	8.80×10^{-5}	8.43	25	280(10)	10.2(0.1)	1.7(0.1)	150	17
11 _{2,10} → 11 _{1,11}	205300.539 ^F	70.2	5.32×10^{-5}	4.55	23	74(9)	10.0(0.1)	1.2(0.2)	58	7
3 _{2,2} → 2 _{1,1}	208700.337 ^F	15.3	6.72×10^{-5}	1.67	7	131(10)	10.3(0.1)	1.6(0.2)	75	10
11 _{1,11} → 10 _{0,10}	221965.221 ^F	60.4	1.14×10^{-4}	7.71	23	228(8)	10.2(0.1)	1.8(0.1)	122	17
4 _{2,2} → 3 _{1,3}	235151.721 ^F	19.0	7.69×10^{-5}	1.71	9	105(19)	10.4(0.1)	1.4(0.4)	58	4
5 _{2,4} → 4 _{1,3}	241615.798 ^F	23.6	8.46×10^{-5}	2.12	11	161(10)	10.3(0.1)	2.6(0.3)	61	5
14 _{0,14} → 13 _{1,13}	244254.220 ^F	93.9	1.64×10^{-4}	10.51	29	143(13)	10.2(0.1)	1.4(0.1)	99	7
10 _{3,7} → 10 _{2,8}	245563.423 ^F	72.7	1.19×10^{-4}	5.44	21	48(13)	10.3(0.1)	1.0(0.4)	43	4
15 _{2,14} → 15 _{1,15}	248057.403 ^F	119.3	8.06×10^{-5}	5.27	31	77(11)	10.4(0.2)	2.4(0.4)	30	4
13 _{1,13} → 12 _{0,12}	251199.676 ^F	82.2	1.76×10^{-4}	9.63	27	283(11)	10.2(0.1)	1.8(0.1)	165	16
8 _{3,5} → 8 _{2,6}	251210.586 ^F	55.2	1.20×10^{-4}	4.14	17	49(15)	10.0(0.1)	1.0(0.3)	46	6
6 _{3,3} → 6 _{2,4}	254280.537 ^F	41.4	1.14×10^{-4}	2.89	13	44(13)	10.3(0.2)	2.3(0.4)	34	5
4 _{3,1} → 4 _{2,2}	255553.303 ^F	31.3	9.28×10^{-5}	1.61	9	40(5)	10.8(0.1)	0.9(0.3)	35	4
7 _{3,5} → 7 _{2,6}	257099.967 ^F	47.8	1.22×10^{-4}	3.48	15	43(7)	10.3(0.2)	1.2(0.2)	25	4
9 _{3,7} → 9 _{2,8}	258942.200 ^F	63.5	1.32×10^{-4}	4.65	19	38(7)	10.4(0.2)	1.2(0.2)	30	4
11 _{3,9} → 11 _{2,10}	262256.907 ^F	82.8	1.41×10^{-4}	5.78	23	34(7)	10.2(0.1)	1.2(0.1)	53	6
4 _{4,0} → 5 _{3,3}	262333.965 ^F	48.5	6.32×10^{-6}	0.10	9	16(7)	10.5(0.2)	1.0(0.3)	20	2
7 _{2,6} → 6 _{1,5}	271529.016 ^F	35.5	1.11×10^{-4}	2.67	15	68(16)	10.1(0.2)	1.8(0.5)	44	4
15 _{1,15} → 14 _{0,14}	281762.601 ^F	107.4	2.61×10^{-4}	11.65	31	153(11)	10.0(0.1)	2.0(0.3)	75	7
6 _{2,4} → 5 _{1,5}	282036.568 ^F	29.2	1.00×10^{-4}	1.87	13	113(9)	10.4(0.1)	2.0(0.1)	53	6
16 _{0,16} → 15 _{1,15}	283464.770 ^F	121.0	2.70×10^{-4}	12.60	33	127(16)	9.8(0.3)	2.7(0.4)	42	5
8 _{5,3} → 9 _{4,6}	287485.506 ^F	94.4	2.44×10^{-5}	0.56	17	16(7)	10.8(0.1)	0.6(0.1)	44	2

Notas. Ajuste de todas las líneas rotacionales presentadas en Muller et al. 2000c.

Tabla 6.10: Continuación.

Transition	Frequency	E_u/k	A_{ul}	S_{ul}	g_u	$\int T_{MB} dv$	v_{LSR}	Δv	T_{MB}	S/N
$(J_{K_a, K_c})_u \rightarrow (J_{K_a, K_c})_l$	[MHz]	[K]	[s ⁻¹]			[mK km s ⁻¹]	[km s ⁻¹]	[km s ⁻¹]	[mK]	
$9_{2,8} \rightarrow 8_{1,7}$	298576.309 ^F	51.0	1.44×10^{-4}	3.32	19	97(15)	10.4(0.1)	1.5(0.1)	61	5
$4_{3,1} \rightarrow 3_{2,2}$	332505.243 ^F	31.3	3.29×10^{-4}	2.59	9	146(36)	10.4(0.1)	1.8(0.1)	107	3
$8_{2,6} \rightarrow 7_{1,7}$	334673.355 ^F	43.1	1.27×10^{-4}	1.86	17	114(25)	10.2(0.2)	1.7(0.3)	77	4
$5_{3,3} \rightarrow 4_{2,2}$	351257.225 ^F	35.9	3.36×10^{-4}	2.75	11	139(34)	10.3(0.2)	1.5(0.4)	89	3

Tabla 6.11: Parámetros de línea del ion molecular HCO⁺ y de sus isotópologos.

Species	Transition	Frequency	E_u/k	A_{ul}	S_{ul}	g_u	$\int T_{MB} dv$	v_{LSR}	Δv	T_{MB}	S/N
	$J_u \rightarrow J_l$	[MHz]	[K]	[s ⁻¹]			[mK km s ⁻¹]	[km s ⁻¹]	[km s ⁻¹]	[mK]	
HCO ⁺	$1 \rightarrow 0$	89188.526 ^F	4.3	4.16×10^{-5}	1.0	3	33900(100)	10.5(<0.1)	2.6(<0.1)	12100	315
	$3 \rightarrow 2$	267557.626 ^F	25.7	1.44×10^{-3}	3.0	7	57700(90)	10.5(<0.1)	2.8(<0.1)	19000	1400
	$4 \rightarrow 3$	356734.225 ^F	42.8	3.55×10^{-3}	4.0	9	53800(90)	10.4(<0.1)	3.1(<0.1)	16500	175
H ¹³ CO ⁺	$1 \rightarrow 0$	86754.288 ^F	4.2	3.83×10^{-5}	1.0	3	600(9)	10.5(<0.1)	2.6(0.1)	220	60
	$2 \rightarrow 1$	173506.695 ^{W,a}	12.5	3.68×10^{-4}	2.0	5	930(87)	—	—	—	12
	$3 \rightarrow 2$	260255.338 ^W	25.0	1.33×10^{-3}	3.0	7	1389(25)	—	—	—	47
	$4 \rightarrow 3$	346998.336 ^F	41.6	3.27×10^{-3}	4.0	9	940(45)	10.5(<0.1)	3.1(0.2)	288	16
HC ¹⁸ O ⁺	$1 \rightarrow 0$	85162.224 ^F	4.1	3.62×10^{-5}	1.0	3	46(7)	10.5(0.1)	1.8(0.4)	25	7
	$2 \rightarrow 1$	170322.627 ^W	12.3	3.48×10^{-4}	2.0	5	164(57)	—	—	—	4
	$3 \rightarrow 2$	255479.391 ^F	24.5	1.26×10^{-3}	3.0	7	109(15)	10.5(0.1)	1.9(0.4)	55	9
DCO ⁺	$3 \rightarrow 2$	216112.580 ^F	20.7	7.61×10^{-4}	3.0	7	69(15)	10.2(0.3)	2.4(0.6)	26	3

Notas. Ajuste de todas las líneas rotacionales presentadas en Buffa et al. 1994, Buffa et al. 2006, Tinti et al. 2007, Hirao et al. 2008 y Cazoli et al. 2012. ^a Solapada con una línea de HCO.

Tabla 6.12: Parámetros de línea del ion molecular HCS⁺.

Transition	Frequency	E_u/k	A_{ul}	S_{ul}	g_u	$\int T_{MB} dv$	v_{LSR}	Δv	T_{MB}	S/N
$J_u \rightarrow J_l$	[MHz]	[K]	[s ⁻¹]			[mK km s ⁻¹]	[km s ⁻¹]	[km s ⁻¹]	[mK]	
$2 \rightarrow 1$	85347.875 ^F	6.1	1.11×10^{-5}	2.0	5	87(7)	10.6(0.1)	1.8(0.2)	47	11
$3 \rightarrow 2$	128020.522 ^W	12.3	4.01×10^{-5}	3.0	7	224(70)	—	—	—	4
$4 \rightarrow 3$	170691.620 ^W	20.5	9.86×10^{-5}	4.0	9	448(101)	—	—	—	7
$5 \rightarrow 4$	213360.654 ^F	30.7	1.97×10^{-4}	5.0	11	255(20)	10.5(0.1)	2.4(0.3)	99	9
$6 \rightarrow 5$	256027.107 ^F	43.0	3.46×10^{-4}	6.0	13	300(13)	10.6(<0.1)	2.2(0.1)	130	13
$7 \rightarrow 6$	298690.463 ^F	57.3	5.55×10^{-4}	7.0	15	340(25)	10.6(<0.1)	1.8(0.2)	182	12
$8 \rightarrow 7$	341350.206 ^F	73.7	8.35×10^{-4}	8.0	17	182(60)	10.8(0.2)	1.6(0.7)	106	3

Notas. Ajuste de todas las líneas rotacionales presentadas en Margules et al. 2003.

Tabla 6.13: Parámetros de línea de la molécula HCN y de sus isotopólogos.

Species	Transition	Frequency	E_u/k	A_{ul}	S_{ul}	g_u	$\int T_{MB} dv$	v_{LSR}	Δv	T_{MB}	S/N
	$J_u \rightarrow J_l$	[MHz]	[K]	[s^{-1}]			[mK km s^{-1}]	[km s^{-1}]	[km s^{-1}]	[mK]	
HCN ^a	1,1 \rightarrow 0,1	88630.415 ^F	4.3	2.41×10^{-5}	1.00	3	11472(99)	10.7(<0.1)	2.4(<0.1)	4403	670
	1,2 \rightarrow 0,1	88631.847 ^F	4.3	2.41×10^{-5}	1.70	5	27013(94)	10.7(<0.1)	2.2(<0.1)	11560	1850
	1,0 \rightarrow 0,1	88633.936 ^F	4.3	2.41×10^{-5}	3.30	1	3946(99)	10.7(<0.1)	2.3(<0.1)	1612	250
	3 \rightarrow 2	265886.433 ^F	25.5	8.35×10^{-4}	3.00	7	42591(51)	10.5(<0.1)	3.6(<0.1)	11269	930
	4 \rightarrow 3	354505.476 ^F	42.5	2.05×10^{-3}	4.00	9	27692(118)	10.4(<0.1)	3.2(<0.1)	8060	90
H ¹³ CN ^b	1,1 \rightarrow 0,1	86338.735 ^F	4.1	2.22×10^{-5}	1.00	3	473(8)	10.5(<0.1)	2.0(<0.1)	225	60
	1,2 \rightarrow 0,1	86340.166 ^F	4.1	2.22×10^{-5}	1.67	5	833(8)	10.6(<0.1)	2.0(<0.1)	401	120
	1,0 \rightarrow 0,1	86342.255 ^F	4.1	2.23×10^{-5}	0.33	1	157(7)	10.5(<0.1)	1.8(0.1)	80	25
	2 \rightarrow 1	172677.851 ^W	12.4	2.14×10^{-4}	2.00	5	1561(95)	—	—	—	17
	3 \rightarrow 2	259011.798 ^F	24.9	7.72×10^{-4}	3.00	7	906(20)	10.6(<0.1)	1.8(0.1)	473	43
	4 \rightarrow 3	345339.769 ^F	41.4	1.90×10^{-3}	4.00	9	434(33)	10.6(<0.1)	1.7(0.2)	240	12
DCN ^c	2 \rightarrow 1	144828.001 ^W	10.4	1.27×10^{-4}	2.00	5	1165(24)	—	—	—	48
	3 \rightarrow 2	217238.538 ^F	20.9	4.60×10^{-4}	3.00	7	493(13)	10.4(<0.1)	2.1(0.1)	220	30
	4 \rightarrow 3	289644.917 ^W	34.8	1.13×10^{-3}	4.00	9	475(21)	—	—	—	23
HC ¹⁵ N ^d	1 \rightarrow 0	86054.966 ^F	4.1	2.20×10^{-5}	1.00	3	299(6)	10.7(<0.1)	1.8(<0.1)	153	45
	2 \rightarrow 1	172107.957 ^W	12.4	2.11×10^{-4}	2.00	5	386(94)	—	—	—	5
	3 \rightarrow 2	258156.996 ^F	24.8	7.65×10^{-4}	3.00	7	229(13)	10.7(<0.1)	1.9(0.2)	113	12
	4 \rightarrow 3	344200.109 ^F	41.3	1.88×10^{-3}	4.00	9	49(14)	10.3(0.1)	0.5(0.2)	103	2

Notas. Ajuste de todas las líneas rotacionales presentadas en ^a Maiwald et al. 2000; ^b Maiwald et al. 2000 y Cazzoli et al. 2005a; ^c Preusser et al. 1993 y Brunken et al. 2004; y ^d Cazzoli et al. 2005b.

Tabla 6.14: Parámetros de línea de la molécula HNC y de sus isotopólogos.

Species	Transition	Frequency	E_u/k	A_{ul}	S_{ul}	g_u	$\int T_{MB} dv$	v_{LSR}	Δv	T_{MB}	S/N
	$J_u \rightarrow J_l$	[MHz]	[K]	[s^{-1}]			[mK km s^{-1}]	[km s^{-1}]	[km s^{-1}]	[mK]	
HNC ^a	1 \rightarrow 0	90663.563 ^F	4.4	2.69×10^{-5}	1.0	3	7027(34)	10.8(<0.1)	2.2(<0.1)	2983	630
	3 \rightarrow 2	271981.107 ^F	26.1	9.34×10^{-4}	3.0	7	7040(33)	10.6(<0.1)	2.4(<0.1)	2729	190
HN ¹³ C ^b	1 \rightarrow 0	87090.860 ^F	4.2	2.38×10^{-5}	1.0	3	115(7)	10.8(0.1)	2.4(0.2)	44	15
	3 \rightarrow 2	261263.473 ^W	25.1	8.28×10^{-4}	3.0	7	182(46)	—	—	—	4
H ¹⁵ NC ^c	1 \rightarrow 0	88865.702 ^F	4.3	2.53×10^{-5}	1.0	3	16(6)	10.4(0.2)	1.0(0.5)	15	4
	3 \rightarrow 2	266587.834 ^F	25.6	8.79×10^{-4}	3.0	7	15(5)	10.7(0.1)	0.4(0.2)	35	2
DNC ^d	3 \rightarrow 2	228910.481 ^F	22.0	5.57×10^{-4}	3.0	7	42(15)	10.9(0.2)	1.2(0.4)	33	3

Notas. Ajuste de todas las líneas rotacionales presentadas en ^a Creswell et al. 1976, Okabayashi et al. 1993, Thorwirth et al. 2000b y Amano et al. 2002; ^c Saykally et al. 1976, Pearson et al. 1976 y Maki et al. 2001; y ^d Brunken et al. 2006, Bechtel et al. 2006, Creswell et al. 1976 y Okabayashi et al. 1993. ^b Constantes rotacionales obtenidas por el ajuste de la línea $J = 1 \rightarrow 0$ medida por van der Tak et al. 2009 y la línea $J = 2 \rightarrow 1$ medida por Pearson et al. 1976 y los datos IR de Maki et al. 2001.

Tabla 6.15: Parámetros de línea de la molécula OCS.

Transition	Frequency	E_u/k	A_{ul}	S_{ul}	g_u	$\int T_{MB} dv$	v_{LSR}	Δv	T_{MB}	S/N
$J_u \rightarrow J_l$	[MHz]	[K]	[s ⁻¹]			[mK km s ⁻¹]	[km s ⁻¹]	[km s ⁻¹]	[mK]	
7 \rightarrow 6	85139.104 ^F	16.3	1.72×10^{-6}	7.00	15	32(6)	10.5(0.1)	1.3(0.3)	23	6
8 \rightarrow 7	97301.208 ^F	21.0	2.58×10^{-6}	8.00	17	55(7)	10.4(<0.1)	1.1(0.4)	47	5
9 \rightarrow 8	109463.063 ^F	26.3	3.70×10^{-6}	9.00	19	46(6)	10.4(0.1)	1.5(0.2)	29	8
11 \rightarrow 10	133785.898 ^W	38.5	6.82×10^{-6}	0.11	23	74(25)	—	—	—	2
13 \rightarrow 12	158107.358 ^W	53.1	1.13×10^{-5}	0.13	27	63(19)	—	—	—	2
17 \rightarrow 16	206745.155 ^F	89.3	2.56×10^{-5}	0.17	35	51(8)	10.3(0.2)	1.7(0.3)	28	4
18 \rightarrow 17	218903.355 ^F	99.8	3.04×10^{-5}	0.18	37	36(6)	10.3(0.1)	1.2(0.2)	27	5
20 \rightarrow 19	243218.037 ^F	122.6	4.18×10^{-5}	0.20	41	65(17)	10.5(0.3)	1.7(0.6)	36	5

Notas. Ajuste de todas las líneas rotacionales presentadas en Golubiatnikov et al. 2005. Rehacer DR sin el punto a 110 K.

Tabla 6.16: Parámetros de línea de la molécula H₂S y de sus isotopólogos.

Species	Transition	Frequency	E_u/k	A_{ul}	S_{ul}	g_u	$\int T_{MB} dv$	v_{LSR}	Δv	T_{MB}	S/N
	$(J_{K_a, K_c})_u \rightarrow (J_{K_a, K_c})_l$	[MHz]	[K]	[s ⁻¹]			[mK km s ⁻¹]	[km s ⁻¹]	[km s ⁻¹]	[mK]	
H ₂ S ^a	(<i>o</i>) 1 _{1,0} \rightarrow 1 _{0,1}	168762.753 ^W	8.1	2.68×10^{-5}	1.5	3	14353(83)	—	—	—	390
	(<i>p</i>) 2 _{2,0} \rightarrow 2 _{1,1}	216710.444 ^F	84.0	4.87×10^{-5}	2.2	5	350(9)	10.4(0.1)	2.1(0.1)	159	22
H ₂ ³⁴ S ^b	(<i>o</i>) 1 _{1,0} \rightarrow 1 _{0,1}	167910.516 ^W	8.1	2.62×10^{-5}	1.5	3	1097(32)	—	—	—	35

Notas. (Ajuste de los datos presentados en ^a Belov et al. 1995 y ^b Saleck et al. 1995.

Tabla 6.17: Parámetros de línea del ion molecular N₂H⁺.

Transition	Frequency	E_u/k	A_{ul}	S_{ul}	g_u	$\int T_{MB} dv$	v_{LSR}	Δv	T_{MB}	S/N
$(J, f, F)_u \rightarrow (J, f, F)_l$	[MHz]	[K]	[s ⁻¹]			[mK km s ⁻¹]	[km s ⁻¹]	[km s ⁻¹]	[mK]	
1,1,0 \rightarrow 0,1,1	93171.617 ^F	4.5	3.63×10^{-5}	0.33	1	29.3(8.3)	9.5(0.2)	1.5(0.5)	17.9	2
1,1,2 \rightarrow 0,1,2	93171.913 ^F	4.5	2.72×10^{-5}	1.25	5					
1,1,2 \rightarrow 0,1,1	93171.913 ^F	4.5	9.07×10^{-6}	0.42	5					
1,1,1 \rightarrow 0,1,2	93172.048 ^F	4.5	1.51×10^{-5}	0.42	3					
1,1,1 \rightarrow 0,1,0	93172.048 ^F	4.5	1.21×10^{-5}	0.33	3					
1,1,1 \rightarrow 0,1,1	93172.048 ^F	4.5	9.07×10^{-6}	0.25	3					
1,2,2 \rightarrow 0,1,2	93173.475 ^F	4.5	9.07×10^{-6}	0.42	5	71.5(9.5)	9.6(0.2)	2.6(0.4)	25.6	6
1,2,2 \rightarrow 0,1,1	93173.475 ^F	4.5	2.72×10^{-5}	1.25	5					
1,2,3 \rightarrow 0,1,2	93173.772 ^F	4.5	3.63×10^{-5}	2.33	7					
1,2,1 \rightarrow 0,1,2	93173.963 ^F	4.5	1.01×10^{-6}	0.03	3					
1,2,1 \rightarrow 0,1,0	93173.963 ^F	4.5	2.02×10^{-5}	0.56	3					
1,2,1 \rightarrow 0,1,1	93173.963 ^F	4.5	1.51×10^{-5}	0.42	3					
1,0,1 \rightarrow 0,1,2	93176.261 ^F	4.5	2.02×10^{-5}	0.56	3	13.9(7.1)	10.1(0.2)	1.3(0.4)	10.0	4
1,0,1 \rightarrow 0,1,0	93176.261 ^F	4.5	4.03×10^{-6}	0.11	3					
1,0,1 \rightarrow 0,1,1	93176.261 ^F	4.5	1.21×10^{-5}	0.33	3					

Tabla 6.17: Continuación.

Transition (J, f, F) _u → (J, f, F) _l	Frequency [MHz]	E_u/k [K]	A_{ul} [s ⁻¹]	S_{ul}	g_u	$\int T_{MB} dv$ [mK km s ⁻¹]	v_{LSR} [km s ⁻¹]	Δv [km s ⁻¹]	T_{MB} [mK]	S/N
3,3,3 → 2,3,2	279509.392 ^F	26.8	1.11×10^{-5}	0.03	7	487.8(21.7)	9.5(0.2)	3.0(0.1)	152.5	12
3,3,3 → 2,3,4	279509.502 ^F	26.8	1.12×10^{-5}	0.03	7					
3,3,2 → 2,3,2	279509.826 ^F	26.8	1.24×10^{-4}	0.21	5					
3,3,4 → 2,3,4	279509.880 ^F	26.8	1.31×10^{-4}	0.40	9					
3,3,3 → 2,3,3	279509.899 ^F	26.8	1.18×10^{-4}	0.28	7					
3,3,4 → 2,3,3	279510.277 ^F	26.8	8.75×10^{-6}	0.03	9					
3,3,2 → 2,3,3	279510.333 ^F	26.8	1.56×10^{-5}	0.03	5					
3,2,2 → 2,1,2	279511.134 ^F	26.8	2.64×10^{-4}	0.45	5					
3,2,2 → 2,1,1	279511.346 ^F	26.8	7.93×10^{-4}	1.35	5					
3,2,1 → 2,1,0	279511.386 ^F	26.8	5.88×10^{-4}	0.60	3					
3,4,4 → 2,3,4	279511.415 ^F	26.8	7.87×10^{-5}	0.24	9					
3,3,3 → 2,2,3	279511.431 ^F	26.8	1.24×10^{-4}	0.30	7					
3,2,3 → 2,1,2	279511.510 ^F	26.8	1.06×10^{-3}	2.52	7					
3,2,1 → 2,1,2	279511.638 ^F	26.8	2.94×10^{-5}	0.03	3					
3,3,3 → 2,2,2	279511.687 ^F	26.8	9.95×10^{-4}	2.37	7					
3,3,2 → 2,2,1	279511.799 ^F	26.8	9.40×10^{-4}	1.60	5					
3,3,4 → 2,2,3	279511.809 ^F	26.8	1.12×10^{-3}	3.43	9					
3,4,3 → 2,3,2	279511.811 ^F	26.8	1.16×10^{-3}	2.76	7					
3,4,4 → 2,3,3	279511.812 ^F	26.8	1.18×10^{-3}	3.62	9					
3,2,1 → 2,1,1	279511.850 ^F	26.8	4.41×10^{-4}	0.45	3					
3,4,5 → 2,3,4	279511.863 ^F	26.8	1.26×10^{-3}	4.71	11					
3,3,2 → 2,2,3	279511.865 ^F	26.8	4.98×10^{-6}	0.01	5					
3,4,3 → 2,3,4	279511.921 ^F	26.8	1.61×10^{-6}	0.003	7					
3,3,2 → 2,2,2	279512.121 ^F	26.8	1.74×10^{-4}	0.30	5					
3,4,3 → 2,3,3	279512.318 ^F	26.8	1.01×10^{-4}	0.24	7					
3,2,3 → 2,3,4	279512.414 ^F	26.8	5.14×10^{-6}	0.01	7					
3,2,1 → 2,3,2	279512.432 ^F	26.8	5.60×10^{-6}	0.006	3					
3,2,2 → 2,3,3	279512.436 ^F	26.8	4.98×10^{-6}	0.008	5					
3,2,2 → 2,2,1	279513.901 ^F	26.8	2.94×10^{-5}	0.05	5					
3,2,2 → 2,2,3	279513.968 ^F	26.8	3.05×10^{-5}	0.05	5					
3,2,2 → 2,2,2	279514.223 ^F	26.8	1.36×10^{-4}	0.23	5					
3,2,3 → 2,2,3	279514.344 ^F	26.8	1.74×10^{-4}	0.41	7					
3,2,1 → 2,2,1	279514.405 ^F	26.8	1.47×10^{-4}	0.15	3					
3,2,3 → 2,2,2	279514.599 ^F	26.8	2.18×10^{-5}	0.05	7					
3,2,1 → 2,2,2	279514.727 ^F	26.8	4.90×10^{-5}	0.05	3					

Notas. Frecuencias e intensidades proporcionadas por F. Daniel.

Capítulo 7

Hidrocarburos

7.1. Hidrocarburos en el medio interestelar

Los hidrocarburos son las moléculas orgánicas más sencillas, y contienen únicamente átomos de carbono e hidrógeno. Los hidrocarburos más abundantes en el medio interestelar (e.g. C_2H , $c-C_3H_2$, C_4H , $c-C_3H$) tienen estructuras químicas peculiares (por ejemplo, compuestos muy rígidos como poliinos o cumulenos) y son bastante reactivos y polares debido a la presencia de electrones desapareados sobre los átomos de carbono (e.g. carbenos). Debido a su abundancia y ubicuidad, estas moléculas suelen tener un espectro de rotación brillante que hace que se puedan detectar fácilmente en el medio interestelar (e.g. Guelin et al. 1978, Cernicharo et al. 1991a). Hasta la fecha, C_6H , C_7H y C_8H son los hidrocarburos con mayor número de átomos detectados en el medio interestelar (Cernicharo et al. 1987, Guelin et al. 1987, 1997, Cernicharo & Guelin 1996).

Desde los años 70 se ha hecho evidente que los hidrocarburos son especies comunes en el medio interestelar (e.g. Tucker et al. 1974, Thaddeus et al. 1985a,b, Yamamoto et al. 1987b). Los dos hidrocarburos más abundantes, C_2H y $c-C_3H_2$, se han detectado en regiones con propiedades físicas y químicas muy diferentes, desde nubes difusas (e.g. Lucas & Liszt 2000) hasta nubes oscuras y frías (e.g. Fossé et al. 2001). También se han detectado en fuentes extragalácticas (Fuente et al. 2005, Meier & Turner 2005, 2012, Aladro et al. 2011).

A pesar de que existen numerosos estudios sobre su abundancia y procesos de formación en diferentes condi-

ciones físicas y químicas (e.g. Sakai et al. 2010, Pilleri et al. 2013), todavía no se conoce con exactitud cómo se forman los hidrocarburos en el medio interestelar. Las abundancias calculadas a partir de observaciones realizadas en nubes difusas o en PDRs irradiadas con un bajo flujo de fotones FUV son significativamente más altas que las que predicen los modelos teóricos que solo tienen en cuenta la química en fase gas (e.g. Fossé et al. 2000, Fuente et al. 2003). Este hecho junto con la buena correlación espacial que se observa entre la emisión de hidrocarburos y la emisión de PAHs en la PDR de Cabeza de Caballo apoyó la hipótesis de que la foto-erosión de los PAHs y de los pequeños granos de polvo dominan la formación de hidrocarburos (Pety et al. 2005).

En ambientes más fuertemente irradiados como en la Barra de Orión (con flujos de radiación FUV >300 veces más altos que en Cabeza de Caballo), la situación puede no ser necesariamente la misma. En particular, el gas molecular alcanza temperaturas más altas y se vuelven eficientes nuevas rutas de formación en fase gas, reacciones endotérmicas y reacciones con barreras de activación.

En este Capítulo se investiga la distribución espacial y la química de los hidrocarburos detectados en el frente de disociación de la Barra de Orión. Este trabajo ha sido publicado en Cuadrado et al. 2015 (ver Sección 7.3). En el Apéndice A.1. se incluye el artículo de divulgación “Barra libre de hidrocarburos” basado en este trabajo.

7.2. Análisis y principales resultados

Se ha investigado la distribución espacial y la química de hidrocarburos en el frente de disociación de la Barra de Orión, una posición fuertemente irradiada por fotones FUV. Aproximadamente el 40 % de las líneas detectadas en el barrido espectral provienen de hidrocarburos (C_2H , C_4H , $c-C_3H_2$, $c-C_3H$, $C^{13}CH$, ^{13}CCH , $l-C_3H$ y $l-H_2C_3$ en orden decreciente de abundancia). También se presenta la detección de nueve líneas rotacionales del catión $l-C_3H^+$, lo que ha permitido mejorar sus constantes espectroscópicas. No se han detectado aniones, líneas de estados vibracionales excitados o hidrocarburos deuterados. Estas observaciones se han complementado con mapas $\sim 2' \times 2'$ de la emisión de los hidrocarburos C_2H y $c-C_3H_2$.

En particular, se han obtenido los siguientes resultados:

■ El barrido espectral del frente de disociación de la Barra de Orión contiene más de 850 líneas, de las cuales ~ 200 pertenecen a hidrocarburos.

■ Se presenta la primera detección de los hidrocarburos $C^{13}CH$, ^{13}CCH , $c-C_3H$, $l-C_3H$, C_4H y $l-H_2C_3$ en la Barra de Orión.

■ Se ha determinado la temperatura de rotación (T_{rot}) y la densidad de columna (N) de todas las especies detectadas con la construcción de diagramas rotacionales (ver Capítulo 5). El gran número de líneas detectadas de cada molécula permite determinar estos parámetros con precisión. Los diagramas de rotación se han calculado para dos casos límite: (i) suponiendo que la emisión es extensa (llenado uniforme del haz del telescopio) con $\eta_{bf} = 1$, y (ii) suponiendo que la fuente tiene un tamaño de $\theta_s = 9''$ (fuente semi-extensa), que se corresponde con el tamaño del haz del telescopio IRAM-30m a ~ 1 mm.

Del análisis de los diagramas de rotación (Fig. 7.1) se obtienen los siguientes resultados:

1. C_2H es el hidrocarburo más abundante ($\sim 10^{-8}$), seguido de C_4H ($\sim 10^{-9}$) y $c-C_3H_2$ ($\sim 10^{-10}$).
2. Las especies lineales con tres átomos de carbono ($l-C_3H$, $l-C_3H^+$ y $l-H_2C_3$) son las menos abundantes.
3. Casi todas las especies tienen temperaturas de rota-

ción entre 17 K y 30 K, pero $l-C_3H^+$ y C_4H tienen temperaturas rotacionales mayores que las otras especies, llegando a $T_{rot} = 46$ K y 77 K, respectivamente. Las elevadas temperaturas de rotación inferidas para C_4H y $l-C_3H^+$ sugieren que la excitación de estas especies puede estar afectada por el bombeo radiativo de fotones IR emitidos por el polvo.

4. Las densidades de columna inferidas están dentro del rango $N = 10^{11} - 10^{14} \text{ cm}^{-2}$.
5. Aunque las formas cíclicas tienen momentos dipolares más bajos, las temperaturas de rotación de las especies cíclicas ($c-C_3H_2$ y $c-C_3H$) son más pequeñas que sus respectivos isómeros lineales ($l-H_2C_3$ y $l-C_3H$).
6. Se han obtenido temperaturas de rotación similares para cada especie orto—para del C_3H_2 cíclico y lineal.
7. Se ha calculado una relación orto/para de 2.8 ± 0.6 a partir de las densidades de columna de $c-C_3H_2$, similar al valor esperado a alta temperatura.
8. Se han detectado las cuatro transiciones rotacionales más bajas en energía del C_2H obteniendo una $T_{rot} = 26$ K. Estas transiciones del dominio milimétrico contienen la mayor parte de la densidad de columna. Nagy et al. (2015) detectaron casi en la misma posición seis transiciones de alto número cuántico N con Herschel/HIFI (desde $N = 6 \rightarrow 5$ a $10 \rightarrow 9$) obteniendo una temperatura de rotación mayor ($T_{rot} = 64$ K, ajustando el diagrama rotacional a una única componente). Se ha estimado que este C_2H más caliente sólo contribuye al $\sim 5\%$ de la densidad de columna total del C_2H .

■ Para confirmar la correcta identificación de las líneas y comprobar que no existen solapamientos, se ha modelado el espectro de cada molécula usando el código de transferencia radiativa MADEX asumiendo una distribución de Boltzmann y una temperatura de excitación para la población de niveles rotacionales.

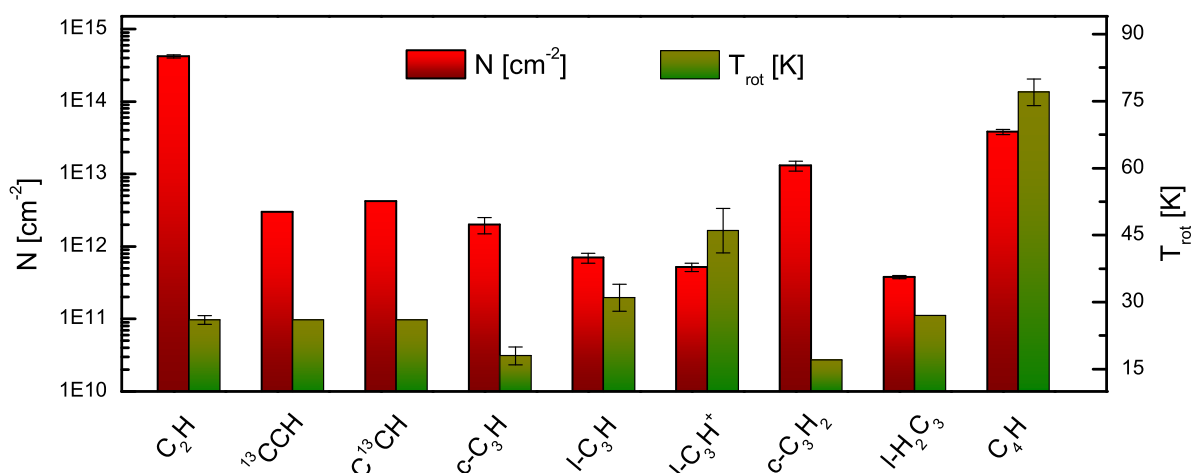


Figura 7.1: Densidades de columna (histograma verde; eje izquierdo) y temperaturas rotacionales (histograma rojo; eje derecho) de los hidrocarburos detectados en el frente de disociación de Barra de Orión.

■ A partir de las densidades de columna se ha calculado un rango de abundancias (para los dos casos límite mencionados anteriormente) para cada especie detectada. La abundancia de las especies detectadas está en un rango de $10^{-8} - 10^{-12}$.

■ Se han estimado las condiciones físicas (promediadas dentro del haz del telescopio) de la posición observada de la Barra a partir de modelos de transferencia radiativa no-LTE LVG con MADEX para aquellas moléculas con tasas de colisión inelásticas conocidas (C_2H y $\text{c-o/p-C}_3\text{H}_2$). Se han ejecutado un gran número de modelos LVG para un amplio rango de densidades de columna, densidades de H_2 ($n(\text{H}_2) = 10^3 - 10^9 \text{ cm}^{-3}$) y temperaturas del gas ($T_k = 10 - 1000 \text{ K}$). Cada modelo sintético obtenido se ha comparado con las líneas observadas con el fin de restringir el rango de condiciones físicas que reproducen las intensidades y los perfiles de línea hacia la posición observada. El modelo que mejor se ajusta a los datos observacionales se obtiene al encontrar el valor mínimo del valor cuadrático medio (rms). Los mejores ajustes para C_2H se obtienen para $T_k \gtrsim 150 \text{ K}$ y $n(\text{H}_2) \gtrsim 10^5 \text{ cm}^{-3}$. Para ajustar las líneas de $\text{c-C}_3\text{H}_2$ se requieren temperaturas más bajas y densidades ligeramente más altas.

■ Se ha calculado un límite superior de la columna de densidad y abundancia para algunos hidrocarburos que no

han sido detectados en el barrido espectral: largas cadenas carbonadas, aniones o isotopólogos deuterados (C_2D , C_5H , C_6H , C_2H^- , C_4H^- , C_6H^- , H_2C_4 y C_2H_3^+). Se han calculado los siguientes límites superiores de abundancia: $[\text{C}_2\text{D}]/[\text{C}_2\text{H}] < 0.2 \%$, $[\text{C}_2\text{H}^-]/[\text{C}_2\text{H}] < 0.007 \%$ y $[\text{C}_4\text{H}^-]/[\text{C}_4\text{H}] < 0.05 \%$.

■ Se han analizado los mapas de la intensidad integrada de línea de $\text{C}_2\text{H } N=3 \rightarrow 2$ a 262.0 GHz , $\text{C}_2\text{H } N=1 \rightarrow 0$ a 87.3 GHz , $\text{c-C}_3\text{H}_2 J_{K_a,K_c} = 6_{1,6} \rightarrow 5_{0,5}$ a 217.8 GHz y $\text{c-C}_3\text{H}_2 J_{K_a,K_c} = 2_{1,2} \rightarrow 1_{0,1}$ a 85.3 GHz , y se han comparado con la emisión a $8 \mu\text{m}$, debida a los PAHs y granos muy pequeños (VSGs, *Very Small Grains*), observada por la cámara IRAC del telescopio espacial Spitzer. La distribución espacial observada de la emisión de C_2H y $\text{c-C}_3\text{H}_2$ es similar pero no coincide con la emisión a $8 \mu\text{m}$ debida a los PAHs y VSG.

■ Los mapas de 3 mm y 1 mm de C_2H y $\text{c-C}_3\text{H}_2$ se reproyectaron a una cuadrícula común para investigar las variaciones en la densidad de columna y en la abundancia de ambos hidrocarburos a lo largo de la Barra. Se seleccionaron dos posiciones representativas, una hacia la posición del barrido espectral (cerca del frente de disociación) y otra en el interior de la nube (en el *clump* denso número #10 de Lis & Schilke 2003). Con las intensidades de línea extraídas de los mapas se ha construido un diagrama de rotación para

cada especie en cada posición para determinar la densidad de columna en cada punto de la nube. Los hidrocarburos muestran abundancias moderadas en el borde de la nube fuertemente irradiado, pero también son abundantes en el interior, donde están más protegidos de la radiación. Se observa un decrecimiento del cociente de densidades de columna $[C_2H]/[c-C_3H_2]$ desde el frente de disociación hasta el interior de la nube.

■ Se han realizado modelos químicos con el código de PDRs Meudon para tratar de explicar las abundancias observadas e investigar la formación de hidrocarburos en fase gas. Nuestros modelos están en concordancia con las densidades de columna observadas de la mayoría de los hidrocarburos (dentro de un factor < 3). El C_4H muestra la mayor discrepancia entre las observaciones y los modelos (el modelo subestima la densidad de columna de C_4H en un factor ~ 3).

■ Se han comparado las densidades de columna inferidas con los modelos fotoquímicos en fase gas, incluyendo el fraccionamiento isotópico de ^{13}CCH y $C^{13}CH$. La relación $[C^{13}CH]/[^{13}CCH]$ es de 1.4 ± 0.1 , lo cual implica que los procesos de fraccionamiento afectan de forma diferente a los dos isótopos ^{13}C del C_2H .

■ Con el objetivo de investigar el papel de la radiación FUV y la densidad del gas en la formación de hidrocarburos, se han comparado las abundancias de C_2H y $c-C_3H_2$ obtenidas en la Barra con varios ambientes interestelares con diferen-

tes características físicas: la región HII ultracompacta Monoceros R2, el núcleo de la galaxia con formación estelar M82, la nebulosa de reflexión NGC 7023, nubes difusas, la PDR de Cabeza de Caballo, la nube fría y densa TMC-1, la protoestrella de baja masa (hot corino) IRAS 16293-2422 y el núcleo denso L1498. Las observaciones en diferentes entornos astrofísicos sugieren que la relación de abundancias entre $[C_2H]/[c-C_3H_2]$ aumenta al incrementarse el valor de χ/n_H , parámetro que controla muchas de las propiedades de una PDR.

■ La baja relación $[c-C_3H]/[I-C_3H] \leq 3$ observada en la Barra de Orión confirma que el frente de disociación es un ambiente con una alta abundancia de electrones (x_e).

Después de comparar la distribución espacial de C_2H y $c-C_3H_2$ con la emisión a $8 \mu m$ debida fundamentalmente a los PAHs, junto con el resultado de los modelos de química en fase gas, se puede concluir que la fotodestrucción de PAHs no es un requisito necesario para explicar las abundancias de los hidrocarburos sencillos observados en PDRs iluminadas por altos flujos de radiación FUV. En estas regiones, las reacciones endotérmicas (o con barreras de activación) entre C^+ , radicales y H_2 pueden dominar la formación de estas especies. Sin embargo, la foto-erosión de PAHs/HACs/VSGs y la química de superficie de los granos de polvo carbonáceos pueden ser necesaria para explicar la abundancia de los hidrocarburos más complejos.

7.3. Cuadrado et al. 2015 (A&A)

A&A 575, A82 (2015)
 DOI: 10.1051/0004-6361/201424568
 © ESO 2015

**Astronomy
&
Astrophysics**

The chemistry and spatial distribution of small hydrocarbons in UV-irradiated molecular clouds: the Orion Bar PDR^{★,★★}

S. Cuadrado^{1,2}, J. R. Goicoechea^{1,2}, P. Pilleri^{3,4}, J. Cernicharo^{1,2}, A. Fuente⁵, and C. Joblin^{3,4}

¹ Grupo de Astrofísica Molecular, Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid (ICMM, CSIC), Sor Juana Ines de la Cruz 3, 28049 Cantoblanco, Madrid, Spain
 e-mail: s.cuadrado@icmm.csic.es

² Centro de Astrobiología (CSIC-INTA), Carretera de Ajalvir km 4, 28850 Torrejón de Ardoz, Madrid, Spain

³ Université de Toulouse, UPS-OMP, IRAP, Toulouse, France

⁴ CNRS, IRAP, 9 Av. colonel Roche, BP 44346, 31028 Toulouse Cedex 4, France

⁵ Observatorio Astronómico Nacional, Apdo. 112, 28803 Alcalá de Henares, Madrid, Spain

Received 9 July 2014 / Accepted 27 November 2014

ABSTRACT

Context. Carbon chemistry plays a pivotal role in the interstellar medium (ISM) but even the synthesis of the simplest hydrocarbons and how they relate to polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs) and grains is not well understood.

Aims. We study the spatial distribution and chemistry of small hydrocarbons in the Orion Bar photodissociation region (PDR), a prototypical environment in which to investigate molecular gas irradiated by strong UV fields.

Methods. We used the IRAM 30 m telescope to carry out a millimetre line survey towards the Orion Bar edge, complemented with $\sim 2' \times 2'$ maps of the C_2H and $c-C_3H_2$ emission. We analyse the excitation of the detected hydrocarbons and constrain the physical conditions of the emitting regions with non-LTE radiative transfer models. We compare the inferred column densities with updated gas-phase photochemical models including ^{13}CCH and $C^{13}CH$ isotopomer fractionation.

Results. Approximately 40% of the lines in the survey arise from hydrocarbons (C_2H , C_4H , $c-C_3H_2$, $c-C_3H$, $C^{13}CH$, ^{13}CCH , $I-C_3H$, and $I-H_2C_3$ in decreasing order of abundance). We detect new lines from $I-C_3H^+$ and improve its rotational spectroscopic constants. Anions or deuterated hydrocarbons are not detected, but we provide accurate upper limit abundances: $[C_2D]/[C_2H] < 0.2\%$, $[C_2H^-]/[C_2H] < 0.007\%$, and $[C_4H^-]/[C_4H] < 0.05\%$.

Conclusions. Our models can reasonably match the observed column densities of most hydrocarbons (within factors of < 3). Since the observed spatial distribution of the C_2H and $c-C_3H_2$ emission is similar but does not follow the PAH emission, we conclude that, in high UV-flux PDRs, photodestruction of PAHs is not a necessary requirement to explain the observed abundances of the smallest hydrocarbons. Instead, gas-phase endothermic reactions (or with barriers) between C^+ , radicals, and H_2 enhance the formation of simple hydrocarbons. Observations and models suggest that the $[C_2H]/[c-C_3H_2]$ ratio (~ 32 at the PDR edge) decreases with the UV field attenuation. The observed low cyclic-to-linear C_3H column density ratio (≤ 3) is consistent with a high electron abundance (x_e) PDR environment. In fact, the poorly constrained x_e gradient influences much of the hydrocarbon chemistry in the more UV-shielded gas. The inferred hot rotational temperatures for C_4H and $I-C_3H^+$ also suggest that radiative IR pumping affects their excitation. We propose that reactions of C_2H isotopologues with $^{13}C^+$ and H atoms can explain the observed $[C^{13}CH]/[^{13}CCH] = 1.4 \pm 0.1$ fractionation level.

Key words. astrochemistry – surveys – photon-dominated region (PDR) – ISM: molecules – ISM: abundances

1. Introduction

Bright photodissociation regions (PDRs) are the transition layers between the ionised gas directly irradiated by strong UV fields (e.g. from massive OB stars) and the cold neutral gas shielded from radiation (e.g. Tielens & Hollenbach 1985). Photodissociation regions are found in many astrophysical environments and spatial scales, from the nuclei of starburst galaxies (e.g. Fuente et al. 2008) to the illuminated surfaces of protoplanetary disks (e.g. Agúndez et al. 2008a). All of them show a characteristic chemistry that can be understood in terms of an active UV photochemistry. The closest and brightest example of such PDR is the so-called Orion Bar, at the interface between

the Orion Molecular Cloud (OMC) and the H₂ region illuminated by the Trapezium stars. The Orion Bar is a prototypical high-UV flux, hot PDR, with a far-UV radiation field (FUV, $6.0 \text{ eV} < h\nu < 13.6 \text{ eV}$) of a few 10^4 times the mean interstellar field (Marconi et al. 1998). Because of its proximity ($414 \pm 7 \text{ pc}$ to the Orion Nebula Cluster, Menten et al. 2007), the Orion Bar offers the opportunity to determine the chemical content, spatial stratification of different species, and chemical formation routes in UV illuminated gas.

The transition from ionised to neutral gas in the Orion Bar has been extensively mapped in various atomic and molecular tracers (see e.g. Tielens et al. 1993; Hogerheijde et al. 1995; van der Werf et al. 1996; Walmsley et al. 2000; Ossenkopf et al. 2013). The detailed analysis of these observations suggested an inhomogeneous density distribution. The most commonly accepted scenario is that an extended gas component, with mean gas densities of 10^{4-5} cm^{-3} , causes the chemical stratification seen perpendicular to the dissociation front as the FUV field is

* Based on observations obtained with the IRAM 30 m telescope. IRAM is supported by INSU/CNRS (France), MPG (Germany), and IGN (Spain).

** Appendices are available in electronic form at <http://www.aanda.org>

A&A 575, A82 (2015)

attenuated. In this context, the low energy transitions of different molecules, including CO, would arise from this extended interclump medium (Hogerheijde et al. 1995; Jansen et al. 1995; Simon et al. 1997; van der Wiel et al. 2009; Habart et al. 2010; van der Tak et al. 2013). In addition, another component of higher density clumps was invoked to fit the observed high- J CO, CO^+ , and other high density and temperature tracers (Burton et al. 1990; Parmar et al. 1991; Stoerzer et al. 1995; Young Owl et al. 2000; Batrla & Wilson 2003). Owing to its small filling factor, this clumpy structure would allow FUV radiation to permeate the region. Although this scenario is still controversial, recent 3D models of the Orion Bar structure are compatible with this morphology (Andree-Labsch et al. 2014).

Depending on the FUV field strength and on the gas density, different processes contribute to the gas heating. Photoelectrons from polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs) and grains heat the interclump gas from ~ 85 K (Hogerheijde et al. 1995) to ≥ 500 K at the dissociation front (Allers et al. 2005; van der Werf et al. 2013). In addition, the temperature at the surface ($A_V < 1$) of dense clumps can go above 1000 K because collisional deexcitation of vibrationally excited H_2 dominates the gas heating (Burton et al. 1990). The presence of both hot gas and FUV-pumped, vibrationally excited H_2 (observed in the near-IR at $\sim 2.1 \mu\text{m}$) triggers a distinctive PDR chemistry where highly endothermic reactions and reactions with large activation barriers can proceed quickly (Agúndez et al. 2010). Examples of this peculiar chemistry are the reactions of H_2 with C^+ , O, and S^+ (all very abundant in PDR edges) that allow the formation of CH^+ , OH, and SH^+ and represent the first steps of the PDR chemistry (see recent detections by Habart et al. 2010; Goicoechea et al. 2011; Nagy et al. 2013; Müller et al. 2014). In addition to these simple hydrides, the abundance of carbon bearing radicals (CN , C_2H , $c\text{-C}_3\text{H}_2$) was found to increase close to the dissociation front (e.g. Jansen et al. 1995; Fuente et al. 1996).

The formation and chemical behaviour of hydrocarbon molecules in the interstellar medium (ISM) are long standing problems in astrochemistry. Since the early 1970s it has been evident that hydrocarbons, the simplest organic molecules, are ubiquitous in the ISM (e.g. Tucker et al. 1974; Thaddeus et al. 1985a,b; Yamamoto et al. 1987b). These molecular species have peculiar chemical structures (e.g. very rigid compounds such as polyynes or cumulenes) and are quite reactive and polar because of the presence of unpaired electrons on the carbon atoms (e.g. carbenes). Owing to their abundance and ubiquity, these molecules often have a bright rotational spectrum which makes them easily detected in the ISM (e.g. Guelin et al. 1978; Cernicharo et al. 1991a). Cernicharo et al. (1984) were the first to show that carbon chain radicals and cyanopolyynes were present in several cold cores in the Taurus region. The C_2H and $c\text{-C}_3\text{H}_2$ molecules, among the most abundant hydrocarbons, are detected in very different environments, ranging from diffuse clouds (e.g. Lucas & Liszt 2000) to cold dark clouds (e.g. Fossé et al. 2001). They have even been detected towards extragalactic sources (Fuente et al. 2005; Meier & Turner 2005, 2012; Aladro et al. 2011). The longest hydrocarbon chain radicals found in the ISM so far are C_6H , C_7H , and C_8H (Cernicharo et al. 1987; Guelin et al. 1987, 1997; Cernicharo & Guelin 1996). Despite many studies on their abundance and formation routes in different environments (e.g. Sakai et al. 2010; Liszt et al. 2012; Pilleri et al. 2013), the synthesis of hydrocarbons in the ISM is still poorly understood. Observations towards diffuse interstellar clouds and low-FUV flux PDRs suggest that the inferred abundances are significantly higher than current pure gas-phase

model predictions (e.g. Fossé et al. 2000; Fuente et al. 2003). The good spatial correlation between the hydrocarbon emission and the PAH emission towards the Horsehead PDR led Pety et al. (2005) to suggest that the photo-erosion of PAHs and small carbonaceous grains may dominate the formation of small hydrocarbon molecules. In more strongly irradiated environments like the Orion Bar (> 300 times higher FUV radiation fluxes than the Horsehead) the situation may not necessarily be the same. In particular, the molecular gas attains much higher temperatures and new gas-phase formation routes, endothermic reactions, and reactions with activation energy barriers, become efficient.

In the context of investigating the chemistry in hot molecular gas irradiated by strong FUV radiation fields, we have performed a complete millimetre line survey towards the Orion Bar PDR. This line survey has allowed us to unveil the molecular content, accurately determine the abundances of the detected species, and constrain their formation mechanisms. Approximately 40% of the detected lines arise from small hydrocarbon molecules. In this paper, we report all hydrocarbon lines detected and investigate the spatial distribution of C_2H and $c\text{-C}_3\text{H}_2$ throughout the region. The paper is organised as follows. In Sect. 2 we describe the line survey and the mapping observations. In Sect. 3 we report the observational features of the detected hydrocarbons, while in Sect. 4 we present the C_2H and $c\text{-C}_3\text{H}_2$ integrated line-intensity maps at 3 mm and 1 mm. The data analysis is explained in Sect. 5 and the PDR chemical models of hydrocarbons are reported in Sect. 6. In Sect. 7 we discuss the results, and finally in Sect. 8 we summarise the main conclusions. The results of the whole survey will be reported in a subsequent paper.

2. Observations and data reduction

2.1. Line survey

In 2009 we started a shallow line survey with the aim to investigate the chemistry of the Orion Bar PDR. The observations were conducted with IRAM 30 m telescope at Pico Veleta (Sierra Nevada, Spain), at the position $\alpha_{2000} = 05^{\text{h}} 35^{\text{m}} 20.8^{\text{s}}$, $\delta_{2000} = -05^{\circ} 25' 17.0''$, corresponding to the dissociation front of the Orion Bar, close to what Stoerzer et al. (1995) call the “ CO^+ peak”.

We began the survey with the EMIR receivers (E0 and E1) and WILMA (wideband line multiple autocorrelator) backend, the only broadband backend at that time. In April 2012, with the implementation of the new FFTS (fast fourier transform spectrometer) backends, we began a higher spectral resolution line survey and since then we have observed with the E0, E2, and E3 receivers at 200 kHz spectral resolution covering a total of 217 GHz along 3, 2, 1, and 0.8 mm bands with both backends. The receivers were configured in dual sideband (2SB) for bands E0, E2, and E3 (covering 16 GHz of instantaneous bandwidth per polarization), and in single sideband (SSB) for E1 (8 GHz per polarization). The observing procedure was position switching (PSW) with the reference position located at an offset ($-600''$, $0''$) to avoid the extended molecular emission from the OMC complex. The telescope pointing and focus were checked every two hours through azimuth-elevation cross scans on the nearby continuum source (the 0420-014 quasar). Atmospheric opacity was corrected by calibrating the data using the ATM code (Cernicharo 1985, IRAM internal report; Pardo et al. 2001). The antenna temperature, T_{A}^* , was converted to the main beam temperature, T_{MB} , through the $T_{\text{MB}} = T_{\text{A}}^* / \eta_{\text{MB}}$ relation, where η_{MB} is the antenna efficiency, which is defined as the ratio between main beam efficiency, B_{eff} , and forward efficiency, F_{eff} . All intensities in tables and figures are in main beam

S. Cuadrado et al.: The chemistry and spatial distribution of small hydrocarbons in UV-irradiated molecular clouds

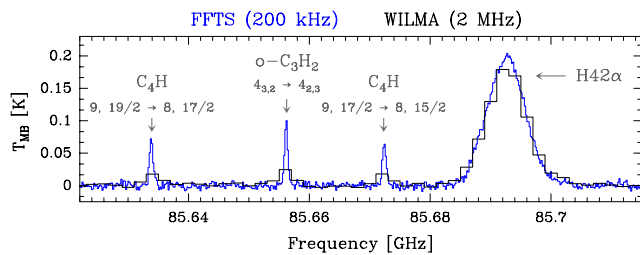


Fig. 1. Zoom to the 3 mm window where both FFTS (200 kHz spectral resolution) and WILMA spectra (2 MHz spectral resolution) are shown. Both data have similar $\text{rms}(\text{channel}) \times \text{channel width}$ [K km s^{-1}] noise values, but molecular line profiles are only resolved with the FFTS. The broad hydrogen recombination lines are resolved at both resolutions.

Table 1. Observed frequency ranges and telescope parameters.

Rec. ^a	Obs. Freq. ^b [GHz]	Backend	η_{MB}^c	HPBW ^d [arcsec]
E0	80.0–117.0	FFTS	0.87–0.82	30.8–21.0
E1	128.0–175.6	WILMA	0.80–0.74	19.1–14.0
E2	202.0–275.0	FFTS	0.70–0.56	12.2–8.9
E3	275.0–304.5	FFTS	0.56–0.50	8.9–8.1
	327.8–359.0	FFTS	0.46–0.40	7.5–6.9

Notes. ^(a) Emir receiver. ^(b) Observed frequency range. ^(c) Antenna efficiencies. ^(d) The half power beam width can be well fitted by $\text{HPBW}[\text{arcsec}] \approx 2460/\text{Frequency}[\text{GHz}]$.

temperature. A local standard of rest (LSR) of 10.7 km s^{-1} has been assumed in the line survey target position in the Orion Bar dissociation front. Table 1 shows an overview of the frequency ranges observed with each backend, as well as the variation in the telescope efficiencies, η_{MB} , and the half power beam width (HPBW) across the covered frequency range.

The intrinsic molecular line widths towards the Orion Bar PDR are typically $\sim 2 \text{ km s}^{-1}$, so the spectral resolution of the backend has to be high enough to resolve the line profiles. The spectral resolution of WILMA backend does not allow the narrow molecular line profiles of the PDR to be resolved, and therefore it only gives information about the integrated line intensity. Most of the hydrocarbon molecular lines were observed with the FFTS backends which does allow the molecular lines to be resolved, thus providing line profile information. Hydrogen recombination lines from ionised gas in the adjacent H₂ region are resolved with both backends because they are intrinsically broad (Fig. 1).

The data were reduced using the CLASS software of the GILDAS package¹. A polynomial baseline of low order (typically second or third order) was subtracted from each $\sim 200 \text{ MHz}$ wide spectrum after all scans were added. The rms noise of our observations obtained by integration during $\sim 4 \text{ h}$ ranges between 4 mK and 20 mK. Despite the good attenuation of the image band signal ($>10 \text{ dB}$), bright lines arising from the image band had to be eliminated in the data processing. The image band lines were identified following the procedure developed by Tercero et al. (2010) according to which each setting was repeated at a slightly shifted frequency ($\sim 50 \text{ MHz}$). The change of the frequency for the lines coming from the image

side band when shifting the observing sky frequency allows all possible contaminating lines of the image band to be identified and removed.

2.2. Maps

The line survey was complemented with maps of the line emission distribution of different species. In particular we present maps of the C_2H ($N = 1 \rightarrow 0$ and $3 \rightarrow 2$) and $c\text{-C}_3\text{H}_2$ ($J_{K_a, K_c} = 2_{1,2} \rightarrow 1_{0,1}$ and $6_{1,6} \rightarrow 5_{0,5}$) line emission. The spectral mapping observations were also obtained at the IRAM 30 m telescope in two separate runs. The 3 mm maps were obtained in July 2012, in approximately 3 h integration time for each configuration. We used the EMIR receivers and the FFTS spectrometers at 50 kHz resolution to get accurate velocity information. Because of the limited bandwidth of these high resolution spectrometers, we used two different configurations for C_2H and $c\text{-C}_3\text{H}_2$. The 1 mm maps were obtained in December 2012, using the FFTS at 200 kHz resolution. The maps were obtained using the on-the-fly observing mode, with an OFF position at $(-600'', 0'')$ relative to the map centre. This position is free of any emission in these two tracers. Data processing consisted in a linear baseline subtraction in each observed spectra. The resulting spectra were finally gridded through convolution by a Gaussian.

3. Results: small hydrocarbon detections

The millimetre molecular line survey of the Orion Bar covers a bandwidth of $\sim 220 \text{ GHz}$ in which more than 200 lines from small hydrocarbon molecules have been identified. The detected lines were attributed to nine different molecules, from the simplest carbon-chain molecule, C_2H , to more complex molecules with five atoms such as C_3H_2 . Lines from two isotopologues (^{13}CCH and C^{13}CH) and one cation ($\text{I-C}_3\text{H}^+$) were detected. No lines from anions or vibrationally excited states of hydrocarbons were identified. Line assignment was carried out using Cernicharo's own spectral catalogue (MADEX², Cernicharo 2012) and two molecular databases with public access: JPL (Pickett et al. 1998)³ and CDMS (Müller et al. 2001, 2005)⁴.

In this section we individually introduce the detected hydrocarbons and summarise their most important spectroscopic features. The studied species are classified according to their empirical formula: C_2H , C_3H^+ , C_3H , C_3H_2 , and C_4H . Table 2 summarises the dipole moments and electronic ground states of the detected species. The spectroscopic and observational line parameters of the detected hydrocarbons are given in Appendix B.

3.1. C_2H

The C_2H radical was first detected in the ISM by Tucker et al. (1974) who detected four components of the $N = 1 \rightarrow 0$ rotational transition in several sources associated with massive star-forming regions. Since then, C_2H has been detected in a wide variety of sources including the circumstellar envelopes around

² MADEX was extensively used in the line identification and excitation analysis of several line surveys conducted by our team: e.g. IRC+10216 (Cernicharo et al. 2000), Sgr B2 (Goicoechea et al. 2004), CRL618 (Pardo et al. 2007), TMC-1 (Marcelino et al. 2007) or Orion BN/KL (Tercero et al. 2010).

³ <http://spec.jpl.nasa.gov/>

⁴ <http://www.astro.uni-koeln.de/cdms/>

¹ <http://www.iram.fr/IRAMFR/GILDAS/>

A&A 575, A82 (2015)

Table 2. Dipole moments (μ), electronic ground state (E.G.S.), and number of hydrocarbon detected lines in this work.

Molecule	μ [Debye]	E.G.S.	Detected Lines	Ref.
C ₂ H	0.77	² Σ^+	25	1
¹³ CCH	0.77	² Σ^+	7	2
C ¹³ CH	0.77	² Σ^+	8	2
<i>l</i> -C ₃ H ⁺	3.00	¹ Σ^+	9	3
<i>l</i> -C ₃ H	3.55	² Π^+	25	1
<i>c</i> -C ₃ H	2.40	² B_2	24	4
<i>c</i> -C ₃ H ₂	3.43	¹ A ₁	50	5
<i>l</i> -H ₂ C ₃	4.10	¹ A ₁	18	6
C ₄ H	0.87	² Σ^+	40	1

References. (1) Woon (1995); (2) The dipole moment is assumed to be the same as for the C₂H; (3) Pety et al. (2012); (4) Yamamoto et al. (1987b); (5) Kanata et al. (1987); (6) DeFrees & McLean (1986).

carbon-rich evolved stars (De Beck et al. 2012, and references therein), diffuse clouds (Lucas & Liszt 2000), cold dark clouds (Wootten et al. 1980), and even in extragalactic sources (Martín et al. 2006). The isotopologues of the ethynyl radical, ¹³CCH, C¹³CH, and CCD, have also been detected in the ISM, first observed towards the Orion A ridge and Orion KL star forming core (3'N, 1'E) (Saleck et al. 1992, 1994; Combes et al. 1985; Vrtilek et al. 1985).

3.1.1. Ethynyl: ¹²C₂H

The C₂H hydrocarbon is a linear molecule with ² Σ^+ electronic ground state, therefore its rotational spectrum shows spin rotation interaction and hyperfine structure. The quantum numbers designating the energy levels are N , J , and F . Spin doubling ($J = N + S$) is produced by the coupling between the rotational angular momentum, N , and the unpaired electron spin, S , while the hyperfine structure ($F = J + I$) is due to the coupling of the angular momentum, J , and the spin of the hydrogen nucleus, I . Electric dipole selection rules require $\Delta F = 0$ (with $0 \leftrightarrow 0$) and $\Delta F = \pm 1$, so the $N = 1 \rightarrow 0$, $2 \rightarrow 1$, $3 \rightarrow 2$, and $4 \rightarrow 3$ transitions detected in this work split into 6, 11, 11, and 11 allowed hyperfine components, respectively. The C₂H spectroscopic constants were obtained from a simultaneous fit of both laboratory and astronomical data by Gottlieb et al. (1983a) and Müller et al. (2000).

We have identified a total of 25 lines of C₂H. They consist of four sets of rotational transitions corresponding to the hyperfine splitting of the $N = 1 \rightarrow 0$ to $4 \rightarrow 3$ transitions. The six hyperfine components of the lowest energy rotational transition ($N = 1 \rightarrow 0$) are well separated in frequency. There are no significant differences in the line widths ($\Delta v \approx 3 \text{ km s}^{-1}$) and line peak velocities. As shown in Table 3, the relative intensities of the observed $N = 1 \rightarrow 0$ hyperfine components agree with the expected relative intrinsic intensities. This shows that the lines are optically thin and do not show hyperfine emission anomalies.

Nine and five spectral lines of each $N = 3 \rightarrow 2$ and $4 \rightarrow 3$ hyperfine transition have also been detected at high resolution, but some hyperfine components are partially or fully overlapped. Five lines of the $N = 2 \rightarrow 1$ transition, corresponding to seven hyperfine rotational transitions, were detected at 2 MHz spectral resolution. The hyperfine structure is not fully

Table 3. Line intensities of the detected C₂H $N = 1 \rightarrow 0$ lines.

Transition (J, F) _{$N=1$} \rightarrow (J, F) _{$N=0$}	S_{ij} ^a	T_{MB} ^b [K]	Relative I^c [x100] LTE ^d	Obs. ^e
(3/2, 1) \rightarrow (1/2, 1)	0.17	0.14	4.25	4.20
(3/2, 2) \rightarrow (1/2, 1)	1.67	1.39	41.72	41.91
(3/2, 1) \rightarrow (1/2, 0)	0.83	0.69	20.73	20.73
(1/2, 1) \rightarrow (1/2, 1)	0.83	0.68	20.73	20.56
(1/2, 0) \rightarrow (1/2, 1)	0.33	0.28	8.32	8.42
(1/2, 1) \rightarrow (1/2, 0)	0.17	0.14	4.25	4.19

Notes. (a) Theoretical line strengths. (b) Observed line intensities in mean beam temperature. (c) Relative intensities. (d) Expected relative intensities ($S_{ij}/\sum S_{ij}$), assuming that lines are optically thin ($\tau < 1$). (e) Observed relative intensity ($T_{MBij}/\sum T_{MBij}$).

resolved and some lines are overlapped. The quantum numbers of the detected C₂H transitions, their spectroscopic parameters, and the results from fitting the line profiles with Gaussians are listed in Table B.1. In Fig. 2 we present the spectra of the $N = 1 \rightarrow 0$ to $4 \rightarrow 3$ rotational lines.

3.1.2. ¹³CCH and C¹³CH

We have detected six lines of ¹³CCH and seven lines of its isotopomer C¹³CH in the 1 mm band (252.4 GHz and 255.7 GHz, respectively), corresponding to the $N = 3 \rightarrow 2$ rotational transition (Fig. 3). Observations of the ¹³C isotopic species of ethynyl have been quite limited. To our knowledge, this is the first detection of both isotopologues in a PDR. The rotational spectrum and hyperfine structure of both ¹³CCH and C¹³CH are described in detail in McCarthy et al. (1995). Table B.2 lists the spectroscopic and observational line parameters. The main hyperfine line of C¹³CH is more intense than the main hyperfine line of ¹³CCH by a factor of 1.4 ± 0.1 (3σ), where the quoted uncertainty is three times the standard deviation. This difference suggests that fractionation processes differently affect the two ¹³C isotopes of C₂H (see Sect. 7.2).

3.2. C₃H⁺

We have also detected a series of lines that Pety et al. (2012) originally attributed to *l*-C₃H⁺ in the Horsehead Nebula PDR (see also McGuire et al. 2013). This detection has been recently confirmed in the laboratory (Brünken et al. 2014) and by quantum chemical calculations (Botschwina et al. 2014). The linear C₃H⁺ is an essential intermediate in the gas-phase synthesis of hydrocarbons through ion-molecule reactions.

Using the CSO telescope, McGuire et al. (2014) searched for *l*-C₃H⁺ towards a large sample of galactic sources. They only detected the molecule towards the Orion Bar (three rotational lines). *l*-C₃H⁺ presents a simple rotational spectrum, with $J + 1 \rightarrow J$ transitions. Here we present nine rotational lines, from $J = 4 \rightarrow 3$ to $13 \rightarrow 12$, the highest frequency line detected so far. Figure 4 shows the detected lines and Table B.3 summarises the observed parameters.

3.2.1. Improved *l*-C₃H⁺ rotational constants

We have fitted all laboratory lines measured by Brünken et al. (2014) together with those measured towards the Horsehead by Pety et al. (2012) and those reported here in the Orion Bar. Since we detect up to the $J = 13 \rightarrow 12$ line, we can better constrain the

S. Cuadrado et al.: The chemistry and spatial distribution of small hydrocarbons in UV-irradiated molecular clouds

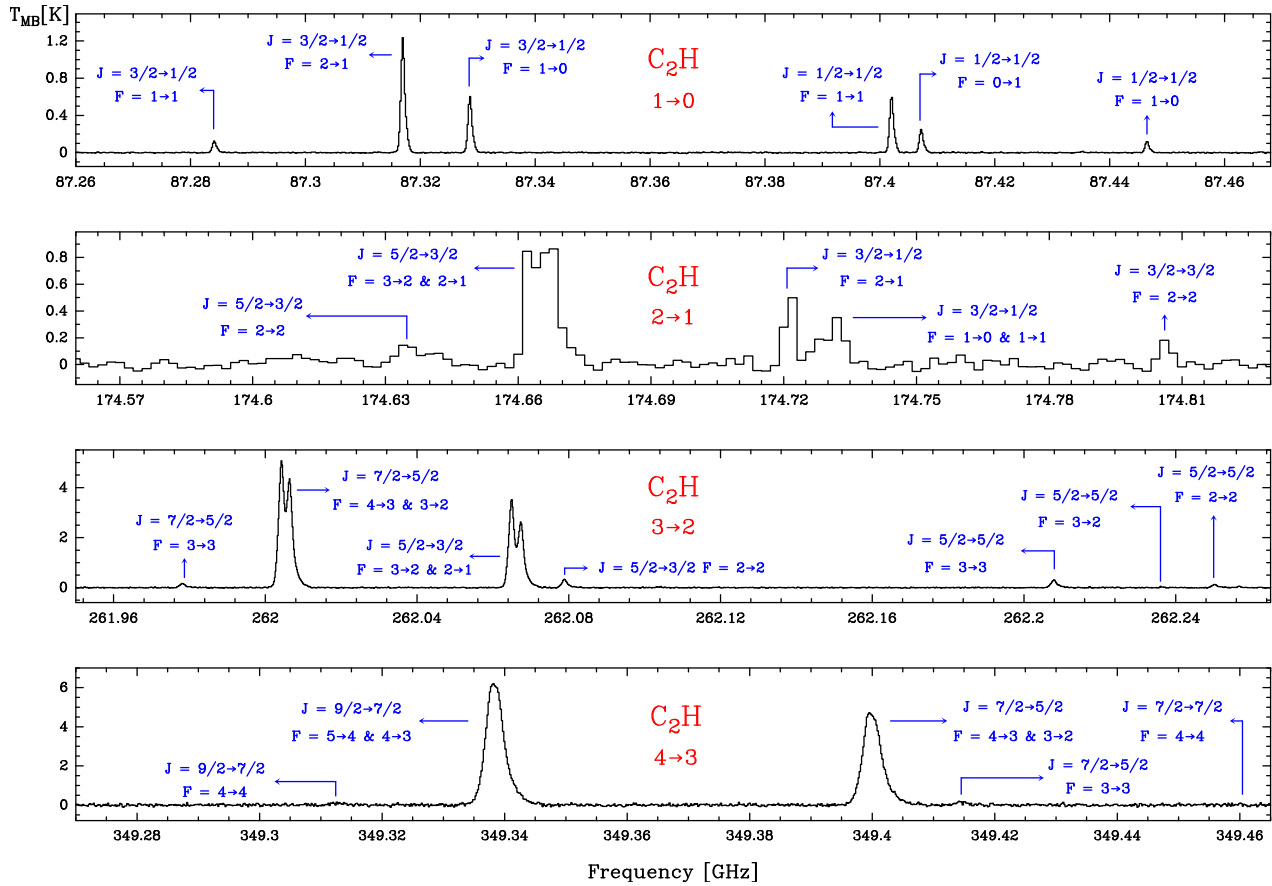


Fig. 2. Detected C_2H hyperfine structure lines of the $N = 1 \rightarrow 0$, $2 \rightarrow 1$, $3 \rightarrow 2$, and $4 \rightarrow 3$ rotational transitions. The $N = 2 \rightarrow 1$ transition was observed at 2 MHz resolution while the $N = 1 \rightarrow 0$, $3 \rightarrow 2$, and $4 \rightarrow 3$ transitions were detected at 200 kHz. Hyperfine structure are only fully resolved in the $N = 1 \rightarrow 0$ transition. The fine and hyperfine components are labelled with the quantum numbers J and F . For clarity, we have not included the labels of the transitions that were too weak to be detected.

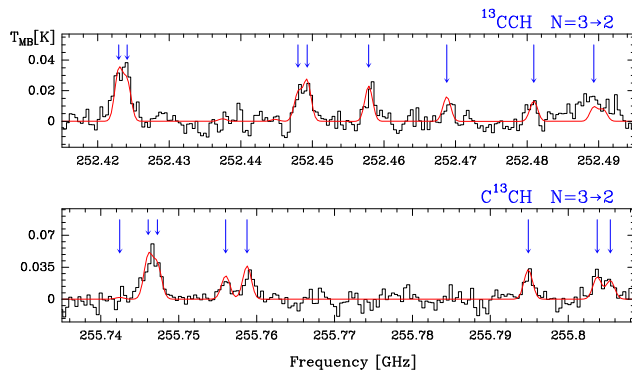


Fig. 3. Detection of the $N = 3 \rightarrow 2$ hyperfine structure of ^{13}CCH (top) and C^{13}CH (bottom) in the Orion Bar PDR (black histogram spectra). A LTE model is overlaid in red (see Sect. 5.2). The position of hyperfine transitions are indicated by the blue arrows. We note the different abscissa and ordinate axis scales in both spectra.

distortion constants. We derive $B = 11244.94793(116)$ MHz and $D = 7.66055(853)$ kHz with a correlation coefficient of 0.77 between both constants. The standard deviation of the fit is 47 kHz. The rotational constants obtained by merging the laboratory measurements and the astronomical data have two times better uncertainties for B and almost one order of magnitude better

accuracy for D . An attempt to fit the distortion constant H produced a slightly better fit (43 kHz), with $H = (2 \pm 1) \times 10^{-7}$ MHz, but with this constant strongly correlated with D and with a significant degradation of the uncertainty of the other constants. Higher J lines will be needed to derive the sextic order distortion constant of $l\text{-C}_3\text{H}^+$. Nevertheless, it is clear that the molecule is rather floppy because the D value is high, even higher than that of C_3 . If the lowest energy bending mode of $l\text{-C}_3\text{H}^+$ is as low as that of C_3 , we estimate that this mode can be populated for gas temperatures around $\sim 30\text{--}40$ K. The lines from the bending mode will consist of a series of doublets (l -doubling), blue-shifted with respect to the lines of the ground vibrational mode. Each member of these doublets will pertain to a series of harmonically related frequencies. We have not found any series of lines with these attributes at the sensitivity level of our survey. Another related molecule having low lying bending modes is C_4H (see discussion in Sect. 7.1).

3.3. C_3H

The C_3H radical is found in the ISM in two isomeric forms: as a linear chain, $l\text{-C}_3\text{H}$, and as a three-carbon ring, $c\text{-C}_3\text{H}$. Both isomers were first detected by their rotational transitions at millimetre wavelengths in TMC-1 (Thaddeus et al. 1985a; Yamamoto et al. 1987b). The $c\text{-C}_3\text{H}$ radical is more energetically stable than $l\text{-C}_3\text{H}$ by ~ 860 K (Sheehan et al. 2008).

A&A 575, A82 (2015)

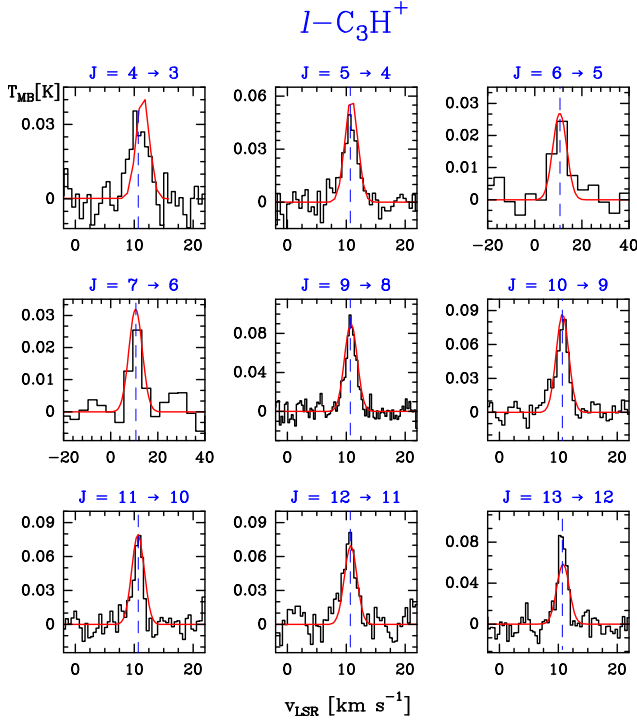


Fig. 4. Series of l -C₃H⁺ lines detected in the Orion Bar PDR. Spectra of the $J = 4 \rightarrow 3$, $5 \rightarrow 4$, $9 \rightarrow 8$, $10 \rightarrow 9$, $11 \rightarrow 10$, $12 \rightarrow 11$, and $13 \rightarrow 12$ rotational transitions of l -C₃H⁺ observed at 200 kHz spectral resolution, and $6 \rightarrow 5$ and $7 \rightarrow 6$ observed at 2 MHz (black histogram spectra). A LTE model is overlaid in red (see Sect. 5.2). The dashed lines indicate the LSR velocity (10.7 km s^{-1}) of the Orion Bar PDR.

3.3.1. Propynylidyne: linear-C₃H

The linear carbon chain, l -C₃H, has a $^2\Pi$ electronic ground state. Its laboratory millimetre wave spectrum was reported by Gottlieb et al. (1985, 1986). The spin-orbit interaction results in two rotational ladders, $^2\Pi_{3/2}$ and $^2\Pi_{1/2}$, with intra-ladder and much weaker cross-ladder transitions. Furthermore, each rotational transition is split by Λ -type doubling due to the nuclei rotation and the unpaired electron motion. In interstellar conditions, only the lower transitions show fully-resolved hyperfine structure.

We have detected 25 lines of l -C₃H, consisting of (i) 12 lines in the $^2\Pi_{1/2}$ ladder ($E_u/k \leq 102.2 \text{ K}$); and (ii) 13 lines in the $^2\Pi_{3/2}$ ladder ($E_u/k \leq 75 \text{ K}$). The l -C₃H lines are rather weak and show very narrow lines profiles ($\Delta v \leq 1.6 \text{ km s}^{-1}$). The hyperfine structure has only been partially resolved in the lowest detected rotational levels. Figure 5 shows three l -C₃H spectra, which are representative examples of the partially resolved hyperfine structure and the Λ -doublet components. Spectroscopic and observational parameters of l -C₃H are summarised in Table B.4.

3.3.2. Cyclopropynylidyne: cyclic-C₃H

The cyclic form, c -C₃H, is an a -type asymmetric top molecule. The c -C₃H rotational level transitions, given by N_{K_a, K_c} , are split into fine and hyperfine levels (labelled by the quantum numbers J and F , respectively). The rotational transitions are governed by the $\Delta J = 0$ and ± 1 selection rules. The laboratory spectrum was first measured by Lovas et al. (1992) and Yamamoto & Saito (1994).

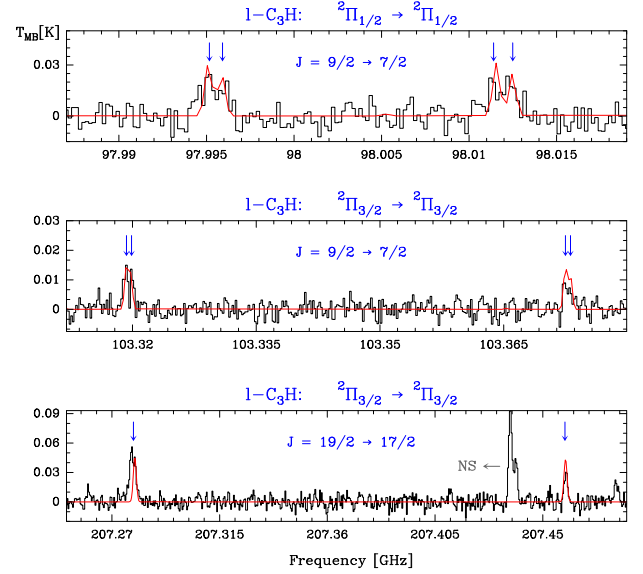


Fig. 5. Examples of l -C₃H detected lines (black histogram spectra). A LTE model is overlaid in red (see Sect. 5.2). l -C₃H lines are indicated by blue arrows. The other spectral features appearing in the selected windows are labelled with their corresponding identification.

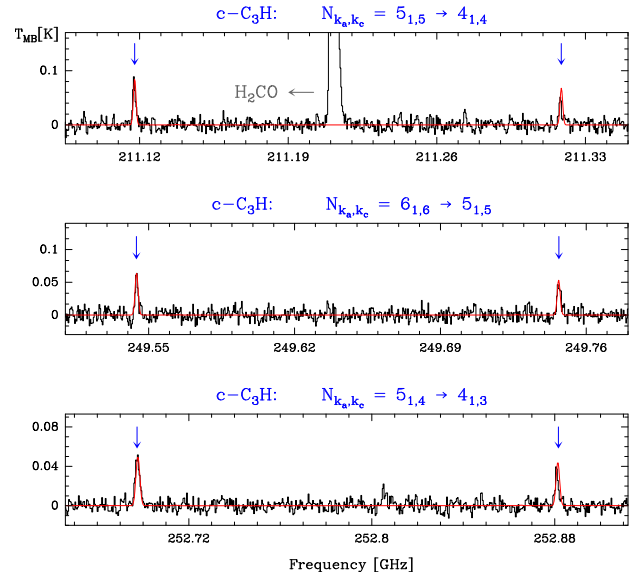


Fig. 6. c -C₃H spectra observed in the 1 mm band (black histogram spectra). A LTE model is overlaid in red (see Sect. 5.2). c -C₃H lines are indicated by blue arrows. The other spectral features appearing in the selected windows are labelled with their corresponding identification.

We have detected 24 lines of c -C₃H. These consist of ten sets of rotational transitions with fine and hyperfine structure lines ($E_u/k \leq 55 \text{ K}$). No transition is completely resolved in its hyperfine components. Examples of c -C₃H spectra are shown in Fig. 6 and the line parameters are listed in Table B.5.

3.4. C₃H₂

Interstellar molecules with the elemental formula C₃H₂ belong to a type of compounds known as carbenes. They are highly reactive because of the two non-bonded electrons on one of the three carbon atoms. Two structural isomers are observed: cyclic

S. Cuadrado et al.: The chemistry and spatial distribution of small hydrocarbons in UV-irradiated molecular clouds

and linear. The cyclic one, the first organic ring detected in the ISM (Thaddeus et al. 1985b; Vrtilek et al. 1987), is ~ 6960 K more stable than the linear form (Dykstra et al. 1979; DeFrees & McLean 1986). Cernicharo et al. (1991a) observed one of the C_3H_2 linear isomers in TMC-1 (hereafter $l\text{-H}_2C_3$) characterised by two or more consecutive double carbon bonds with two non-bonded electrons on the terminal carbon (Cernicharo et al. 1991b; Langer et al. 1997). Although the cyclic form is more abundant and ubiquitous, both C_3H_2 isomers are widely observed in the ISM. The cyclic and linear isomers of C_3H_2 have two indiscernible off-axis hydrogen atoms which impose an additional ortho-para symmetry. The rotational spectra of both isomers were originally reported by Vrtilek et al. (1987, 1990).

3.4.1. Cyclopropenylidene: cyclic- C_3H_2

The cyclic isomer of C_3H_2 is a three-carbon ring with (i) two carbon atoms linked by a double bond (semirigid structure); (ii) one extremely reactive bivalent carbon atom which makes it highly polar (with a large dipole moment of 3.4 Debye); and (iii) two equivalent off-axis hydrogen atoms (responsible for the ortho-para symmetries).

The $c\text{-}C_3H_2$ molecule is an oblate asymmetric top with an asymmetric parameter $\kappa = -0.69$, b-type rotational transitions (ΔK_a and $\Delta K_c = \pm 1$ main selection rules), and without fine or hyperfine structure. Ortho and para levels are described by $K_a + K_c = \text{odd}$ and even values, respectively. We have detected 23 rotational transitions of ortho $c\text{-}C_3H_2$ with $E_u/k \leq 84.6$ K, 17 rotational transitions of para $c\text{-}C_3H_2$ with $E_u/k \leq 54.7$ K, and 10 lines corresponding to several fully overlapped ortho-para transitions. The line profiles of spectrally resolved ortho and para lines at 1 mm are shown in Fig. 7. The line parameters are listed in Table B.6.

3.4.2. Propadienylidene: linear- H_2C_3

In addition to being a carbene, the linear isomer is a cumulene, with a linear and rigid backbone of three carbon atoms linked by adjacent double bonds [$H_2\text{-C}=(C=)_n\text{C:}$]. Because of the linear symmetry and the low mass of the two off-axis equivalent hydrogen atoms, the rotational spectrum of propadienylidene is a nearly prolate top with an asymmetric parameter $\kappa = -0.997$ and a-type R-branch selection rules which involve $\Delta J = 1$, $\Delta K_a = 0$, and $\Delta K_c = 1$ transitions. Para levels have even values of K_a , while ortho levels have odd values.

We observed the lowest para ladder ($J_{0,J} \rightarrow J - 1_{0,J-1}$) with rotational transitions separated by ~ 20.8 GHz, and the lowest ortho ladder ($K_a = 1$), that shows K -type doublets with the two lines displaced by several GHz. Transitions with $K_a > 1$ have not been detected. We have identified 13 lines of ortho species, but only 6 lines for the para species (both with $E_u/k \leq 90.8$ K). The line profiles of spectrally resolved ortho and para lines at 1 mm are shown in Fig. 8. Table B.7 gives the observed line parameters.

3.5. C_4H

The linear butadiynyl, C_4H , is a univalent radical and the simplest example of polyynes, a type of organic species in which molecular structure have single and triple bonds in alternate positions ($\text{-C}\equiv\text{C-}$) $_n$, with $n > 1$. This molecule was first identified in the circumstellar envelope of IRC+10216 (Guelin et al. 1978). Its laboratory microwave spectrum in the ground vibrational state was first obtained by Gottlieb et al. (1983b).

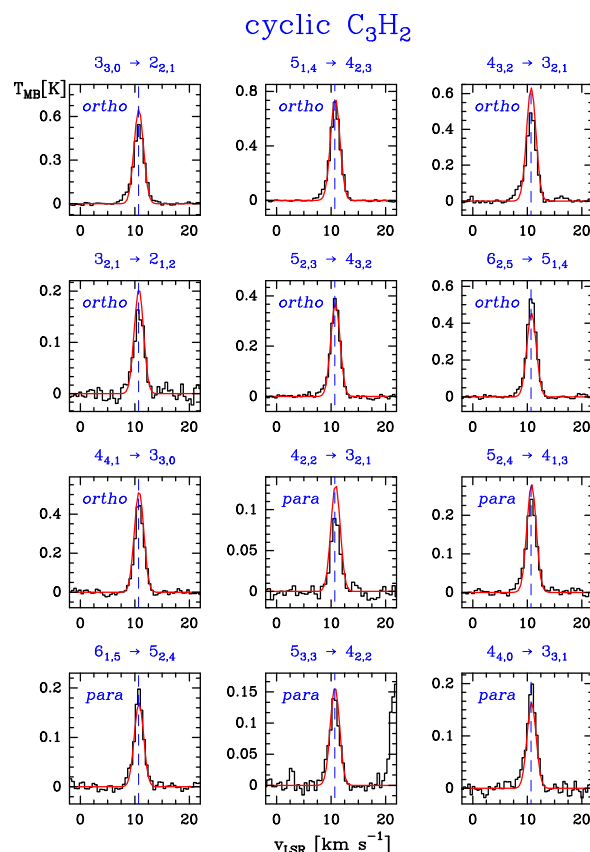


Fig. 7. Observed $c\text{-}C_3H_2$ (black histogram spectra). Best fit LVG model is shown overlaid in red (see Sect. 5.4). The dashed lines indicate the LSR velocity (10.7 km s^{-1}) of the Orion Bar PDR.

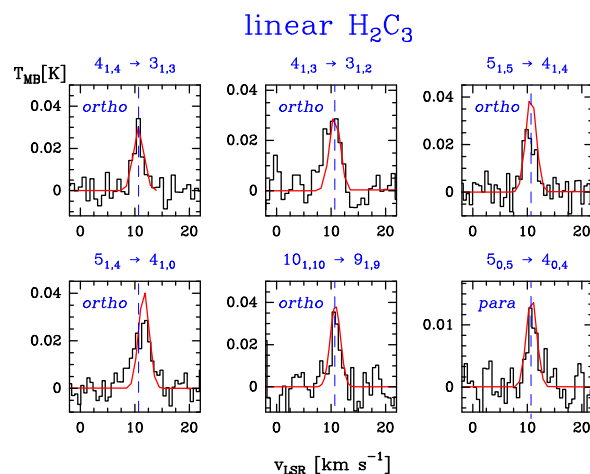


Fig. 8. Observed $l\text{-H}_2C_3$ (black histogram spectra). Best fit LTE model is shown overlaid in red (see Sect. 5.2). The dashed lines indicate the LSR velocity (10.7 km s^{-1}) of the Orion Bar PDR.

The C_4H radical has the same symmetry and electronic ground state ($^2\Sigma^+$) as C_2H , therefore its rotational levels are also split into fine and hyperfine structure. This hyperfine splitting is only fully resolved in the lowest rotational transitions (e.g. Bell et al. 1982, 1983; Guelin et al. 1982). As a consequence, in the studied spectral range, the strongest rotational transitions

A&A 575, A82 (2015)

are doublets. Forty lines of C_4H consisting of 20 successive doublets starting from $N = 9 \rightarrow 8$ have been identified in this work, most of them with high spectral resolution. The C_4H doublets show spectral features that allow us to distinguish them easily: (i) each pair of lines is separated by ~ 38.5 MHz; and (ii) the lowest frequency transition of each doublet is slightly stronger than the second. This is in perfect agreement with the theoretical line strength. Figure 9 shows some of the strongest lines detected at high spectral resolution in the 3 mm and 1 mm bands. Assignments of the line components, as well as the spectroscopic and observed line parameters of the detected lines are given in Table B.8.

4. Spatial distribution of C_2H , $c\text{-}C_3H_2$, and PAHs

Early mapping observations of the Orion Bar (e.g. Tielens et al. 1993; van der Werf et al. 1996) confirmed the PAH/ H_2 /CO spatial stratification predicted by PDR models (e.g. Tielens & Hollenbach 1985). Figure 10 shows the IRAC $8\ \mu\text{m}$ band emission along the Orion Bar taken from the Spitzer archive (colour scale). Analysing the ISOCAM mid-IR spectrum of the Bar with the fitting tool PAHTAT (Pilleri et al. 2012) we estimate that at least $\sim 50\text{--}80\%$ of the IRAC $8\ \mu\text{m}$ filter band emission is produced by PAHs. As in other high UV-flux PDRs, the PAH emission delineates the atomic zone edge of the Orion Bar (see e.g. Berné et al. 2009; Joblin et al. 2010, for Mon R2 and NGC 7023, respectively). The molecular dissociation front traced by the vibrationally excited $H_2\ v = 1 \rightarrow 0\ S(1)$ emission (H_2^* ; black contours in Fig. 10; Walmsley et al. 2000) and also the $[C\ I] 158\ \mu\text{m}$ intensity maxima (Bernard-Salas et al. 2012; Ossenkopf et al. 2013) peak slightly deeper in the cloud than the PAHs.

The increased sensitivity and broader frequency coverage of (sub)mm receivers led to the opportunity to map the faint emission of trace chemical species. Figure 10 also shows the integrated line intensity maps of C_2H ($N = 1 \rightarrow 0$ and $3 \rightarrow 2$ lines at 87.3 GHz and 262.0 GHz, respectively) and $c\text{-}C_3H_2$ ($J_{K_a, K_c} = 2_{1,2} \rightarrow 1_{0,1}$ and $6_{1,6} \rightarrow 5_{0,5}$ lines at 85.3 GHz and 217.8 GHz, respectively) in white contours. The emission from the Orion Bar can be distinguished more easily from the extended OMC1 cloud component by the emission LSR velocity. While OMC1 is brighter in the $8\text{--}10\ \text{km s}^{-1}$ velocity range, the Orion Bar emits predominantly in the $10\text{--}12\ \text{km s}^{-1}$ range. The C_2H and $c\text{-}C_3H_2$ emission contours shown in Fig. 10 are integrated in this interval. Both species show a similar distribution delineating the bar structure of the PDR. However, the morphology of the emission depends on the involved transition energy level, with the more excited lines (those at 1 mm) peaking closer to the cloud edge. The elongated spatial distribution of the hydrocarbon emission is parallel to the H_2^* emission, with the 1 mm C_2H and $c\text{-}C_3H_2$ lines peaking close to the H_2^* intensity peaks. Despite the similar distance, the spatial stratification $[PAH]/[C^+H_2^+\text{-hydrocarbons}]$ is more clearly seen towards the Orion Bar than towards low UV-flux PDRs seen almost edge on (e.g. the Horsehead; Pety et al. 2005). We note that van der Wiel et al. (2009) had previously mapped the $C_2H\ N = 4 \rightarrow 3$ lines with the JCMT telescope and shown that they peak closer to the dissociation front than other (higher energy) lines from SO or H_2CO . Hence, this is a true chemical stratification effect that confirms that C_2H is efficiently produced at the edge of the PDR. The lower excitation lines of both C_2H and $c\text{-}C_3H_2$ (those at 3 mm), however, peak deeper inside the cloud where the gas is less exposed to the FUV-radiation field and clumps/condensations of dense material and large $N(H_2)$ column densities are known to exist (Lis & Schilke 2003).

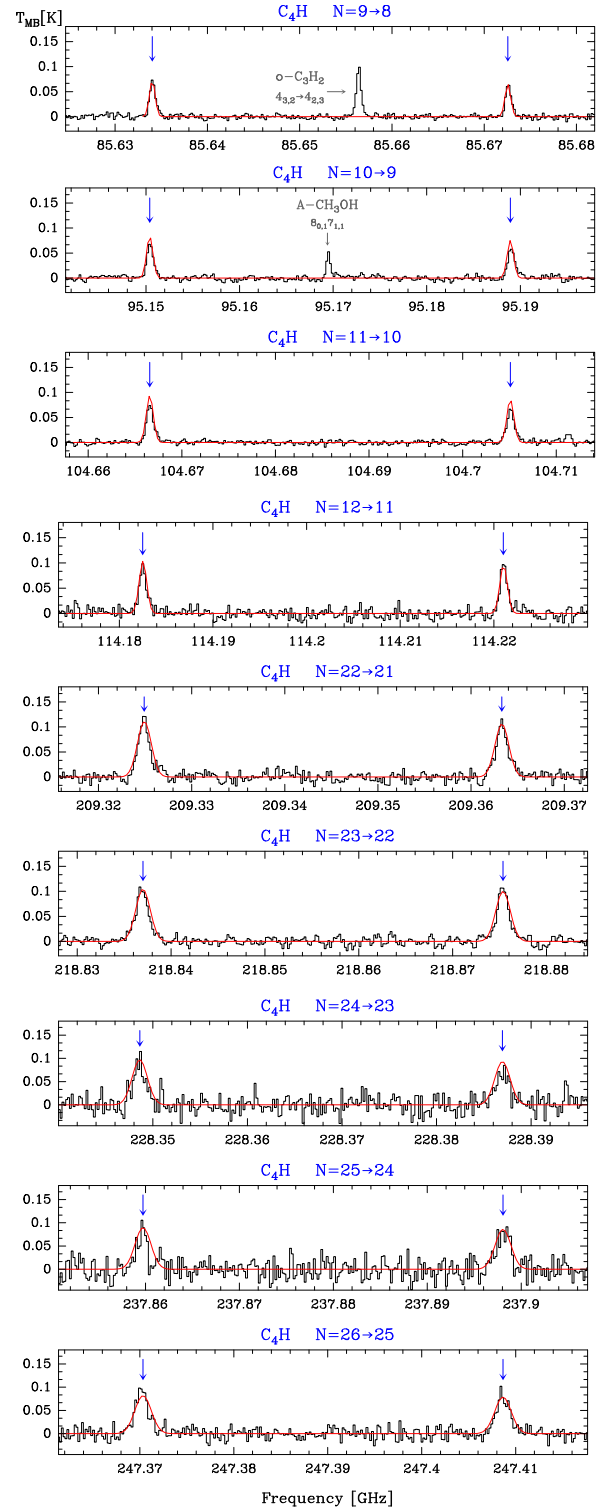


Fig. 9. C_4H spectra observed in the Orion Bar (black histogram spectra). A LTE model is overlaid in red (see Sect. 5.2). Line doublets are indicated by the blue arrows. The other spectral features appearing in the selected windows are labelled with their corresponding identification.

5. Analysis

The large number of lines of the different species detected in the 3, 2, 1, and 0.8 mm surveys allows us to carry out a

S. Cuadrado et al.: The chemistry and spatial distribution of small hydrocarbons in UV-irradiated molecular clouds

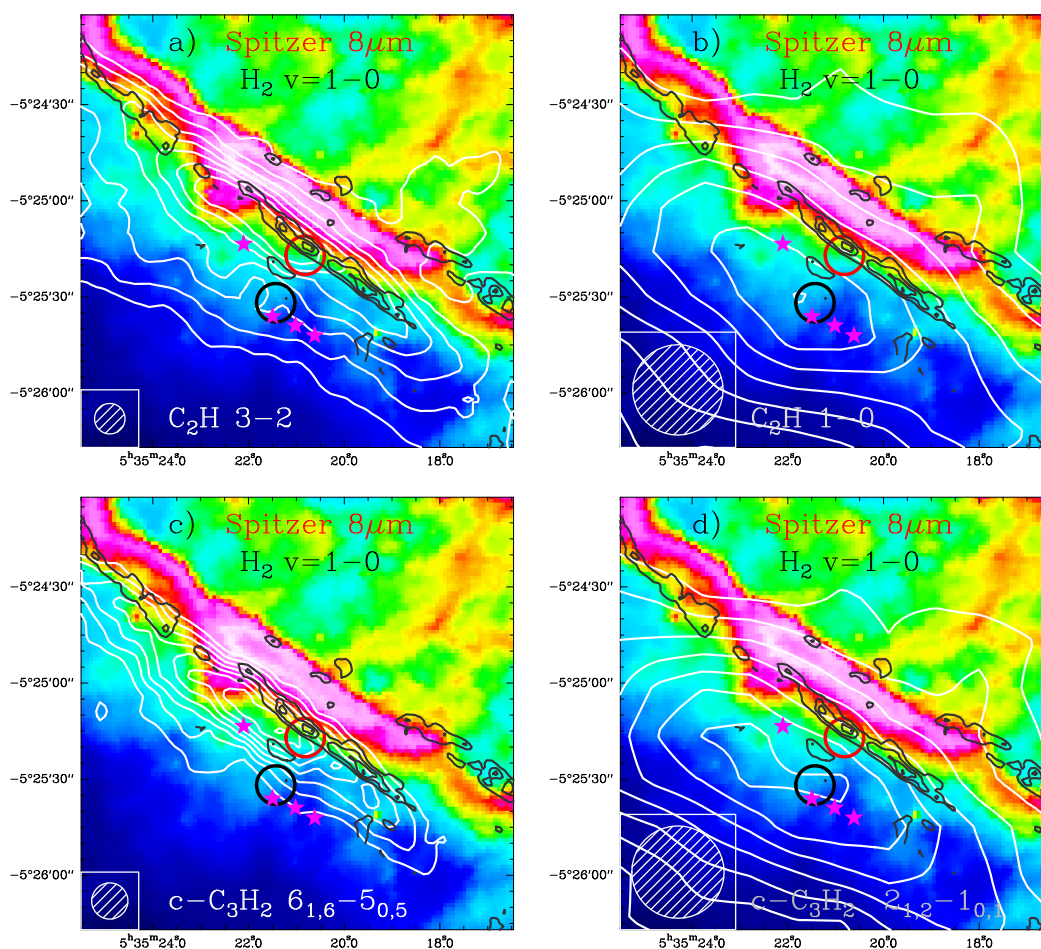


Fig. 10. C_2H and $c-C_3H_2$ integrated line-intensity maps (white contours) of the Orion Bar. *Upper panels:* C_2H **a)** $N = 3 \rightarrow 2$ at 262.0 GHz; and **b)** $N = 1 \rightarrow 0$ at 87.3 GHz. *Lower panels:* $c-C_3H_2$ **c)** $6_{1,6} \rightarrow 5_{0,5}$ at 217.8 GHz; and **d)** $2_{1,2} \rightarrow 1_{0,1}$ at 85.3 GHz. The *Spitzer* $8\mu m$ extended emission due to PAHs and very small grains is in colour scale. Black contours are the $H_2 v = 1 \rightarrow 0$ emission (Walmsley et al. 2000). Stars represent the positions of denser clumps/condensations detected in $H^{13}CN J = 1 \rightarrow 0$ (Lis & Schilke 2003). The IRAM 30 m beams at 1 mm and 3 mm are plotted in the bottom left corner (white striped circle). The target position of the Orion Bar survey, close to the dissociation front, and the molecular peak position beyond the PDR (clump No. 10 of Lis & Schilke 2003; see text for discussion) are indicated with a red and a black circle, respectively. The emission of all lines from C_2H and $c-C_3H_2$ is integrated in the $10\text{--}12\text{ km s}^{-1}$ velocity interval in which the Orion Bar shows prominent emission.

detailed analysis of their excitation to (i) constrain rotational temperatures and column densities accurately; and (ii) investigate the physical conditions for those species with known collisional rates. We first extracted the line profile parameters by Gaussian fits. Second, we calculated rotational temperatures and column densities by constructing rotational population diagrams for each detected molecule. Third, we used the MADEX code (Cernicharo 2012, and references given in Sect. 3) to take into account radiative transfer effects in the observed lines. MADEX computes the intensities of molecular lines in the non-LTE LVG approximation for those molecules whose collisional rates are available, or assuming LTE conditions (to be more precise, a single rotational temperature and a Boltzmann distribution for the rotational levels population) if these rates are not available. See Appendix A for a short comparison with other publicly available code.

5.1. Line parameter fitting procedure

Gaussian profiles were fitted to all detected lines using CLASS. The derived parameters are shown in Appendix B. When two

or more transitions overlap, the total profile was fitted. The overlapped transitions are marked with connecting symbols in the tables. Figure 11 shows the observed line widths of C_2H , $l-C_3H^+$, $l-C_3H$, $c-C_3H_2$, and C_4H versus the energy of the upper level of the transition. Comparing the detected lines, we conclude that (i) the hydrocarbon lines have a pure Gaussian emission profile; (ii) the average LSR velocity towards the Bar for these lines is $10.7 \pm 0.3\text{ km s}^{-1}$; (iii) the intrinsic line widths are typically $\sim 2\text{ km s}^{-1}$; (iv) the broadest lines correspond to the lowest energy transitions at 3 mm observed with a larger beam size ($\sim 30''\text{--}20''$ at 3 mm). This is likely an indication of molecular emission in the extended OMC1 cloud that contributes to broadening the observed lines. The $c-C_3H$ and $l-C_3H$ isomers, however, show narrower line profiles suggesting that they arise from specific (less turbulent and more compact) regions in the Bar.

5.2. Rotational population diagrams

For each molecule, we computed a representative rotational temperature (T_{rot}) and a beam-averaged column density (N) by

A&A 575, A82 (2015)

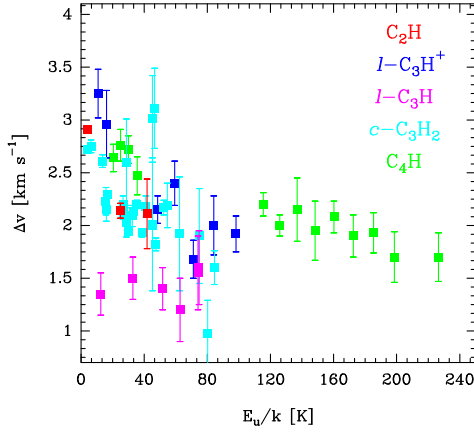


Fig. 11. Hydrocarbon line widths versus transition upper level energy for C_2H , $l-C_3H^+$, $l-C_3H$, $c-C_3H_2$, and C_4H lines.

constructing a rotational diagram, assuming optically thin emission filling the beam and a single rotational temperature for all energy levels (Goldsmith & Langer 1999). The standard relation for the rotational diagram analysis is

$$\ln \frac{N_u}{g_u} = \ln N - \ln Q_{\text{rot}} - \frac{E_u}{kT_{\text{rot}}}, \quad (1)$$

with N_u/g_u given by

$$\frac{N_u}{g_u} = \frac{8\pi k}{hc^3} \cdot \frac{\nu_{ul}^2}{A_{ul} g_u} \cdot \eta_{\text{bf}}^{-1} \cdot \int T_{\text{MB}} dv \quad [\text{cm}^{-2}], \quad (2)$$

where N_u is the column density of the upper level in the optically thin limit [cm^{-2}], N is the total column density [cm^{-2}], g_u is the statistical weight of the upper state of each level, Q_{rot} is the partition function evaluated at a rotational temperature T_{rot} , E_u/k is the energy of the upper level of the transition [K], ν_{ul} is the frequency of the $u \rightarrow l$ transition [s^{-1}], $\int T_{\text{MB}} dv$ is the velocity-integrated line intensity corrected from beam efficiency [K km s^{-1}], and η_{bf} is the beam filling factor. Assuming that the emission source has a 2D Gaussian shape, η_{bf} is equal to $\eta_{\text{bf}} = \theta_s^2 / (\theta_s^2 + \theta_B^2)$, with θ_B meaning the HPBW of the 30 m telescope in arcsec and θ_s the diameter of the Gaussian source in arcsec. The values for ν_{ul} , A_{ul} , g_u , $\int T_{\text{MB}} dv$, and E_u/k for each molecular transition are given in Appendix B and were taken from the MADEX spectral catalogue.

The condition for optically thin emission is correct in our case because we do not expect excessively large hydrocarbon column densities towards the Orion Bar dissociation front. The most abundant hydrocarbon in the Orion Bar is C_2H and, as previously mentioned in Sect. 3.1.1, the relative intensities of the hyperfine components show that lines are optically thin. The rotational diagrams were built considering two limiting cases: (i) that the detected emission is extended, with $\eta_{\text{bf}} = 1$; and (ii) that the emission is semi-extended, assuming that $\theta_s = 9''$ (the typical beam at ~ 1 mm). We considered only lines not blended with other transitions. Ortho and para forms of linear and cyclic C_3H_2 are treated as different species because radiative transitions between both states are forbidden. In order to build the rotational diagram for molecules with hyperfine structure, each hyperfine line component was described without splits, only with a single rotational number N . For this purpose, the integrated intensity, W , level degeneracy, g , and line strength, S ,

of each transition was calculated as the sum of all allowed hyperfine components of each $N + 1 \rightarrow N$ transition. The characteristic frequency, ν , was determined using the weighted average with the relative strength of each line as weight, and the Einstein coefficient, A , was calculated using the usual relation:

$$A = \frac{64\pi^4}{3hc^3} \cdot \frac{\nu^3 S}{g} \cdot \mu^2 \quad [\text{s}^{-1}]. \quad (3)$$

The resulting rotational diagrams are shown in Fig. 12. Rotational temperatures and column densities obtained by linear least squares fits for extended and semi-extended emission are listed in Table 4. The uncertainties shown in Table 4 indicate the uncertainty obtained in the least squares fit of the rotational diagram. The uncertainty obtained in the determination of the line parameters with the Gaussian fitting programme are included in the uncertainty bars at each point of the rotational diagram. Table 4 also shows the estimated abundances with respect to hydrogen nuclei using a line-of-sight $N(\text{H}_2) \approx 3 \times 10^{22} \text{ cm}^{-2}$ column density towards the line survey position. This beam-averaged H_2 column density was derived from our observations of the $C^{18}\text{O}$ lines ($J = 1 \rightarrow 0$, $2 \rightarrow 1$ and $3 \rightarrow 2$ transitions) by constructing a rotational diagram, assuming $^{16}\text{O}/^{18}\text{O} \approx 500$ (Wilson & Rood 1994) and a CO/H_2 abundance of $\sim 10^{-4}$ (lower than the canonical value due to dissociation). The resulting H_2 column density is in good agreement with previous estimations of $N(\text{H}_2)$ close to the dissociation front (see e.g. Hogerheijde et al. 1995). In addition, a $N(\text{H}) \approx 3 \times 10^{21} \text{ cm}^{-2}$ column density of hydrogen atoms has been inferred from H observations towards the Orion Bar (van der Werf et al. 2013). Hence, a small fraction of free H atoms exist.

Rotational temperatures and column densities derived from the rotational diagram of each molecule (assuming extended source) were used as input parameters to model the line profiles using the MADEX radiative transfer model under LTE conditions. Figures 4–6, 8, and 9 show the observational spectra (black histograms) and the modelled spectra (red lines) of $l-C_3H^+$, $l-C_3H$, $c-C_3H_2$, $l\text{-H}_2\text{C}_3$, and C_4H , respectively. The obtained fits using LTE models agree with the observations. The computed optical depths at line centre are $\tau < 0.1$ for C_2H , $o/p\text{-C}_3\text{H}_2$, and C_3H^+ lines, and $\tau < 0.01$ for the rest of the hydrocarbons. Hence, there are no noticeable line opacity effects in the calculated rotational temperatures and column densities.

For those species for which only one rotational line was detected, we estimated their column densities using as an input parameter the rotational temperatures derived from another molecule with similar structure and rotational constants. In particular, the ^{13}CCH and C^{13}CH column densities were estimated assuming that the rotational temperature is similar to that obtained for C_2H . Figure 3 shows the observational (black histogram) and modelled (red lines) spectra of ^{13}CCH and C^{13}CH .

Rotational temperatures range from 17 to 77 K, and column densities from 10^{11} to 10^{14} cm^{-2} . The C_2H radical is by far the most abundant of the detected hydrocarbons, followed by C_4H and $c\text{-}(o+p)\text{-C}_3\text{H}_2$. The linear three-carbon species ($l\text{-C}_3H$ and $l\text{-H}_2\text{C}_3$) are less abundant than their cyclic isomers. The ortho-to-para ratio obtained from the $c\text{-C}_3\text{H}_2$ column density is 2.8 ± 0.6 , similar to the expected value at high temperature. The $[\text{C}^{13}\text{CH}]/[\text{C}^{13}\text{CH}]$ ratio is 1.4 ± 0.1 (3σ). Comparing the rotational temperatures, we conclude that (i) almost all species have $T_{\text{rot}} < 30$ K, but $l\text{-C}_3H^+$ and C_4H are rotationally hotter than the other species, reaching $T_{\text{rot}} = 46$ K and 77 K, respectively; (ii) although cyclic forms have lower dipole moments, the

S. Cuadrado et al.: The chemistry and spatial distribution of small hydrocarbons in UV-irradiated molecular clouds

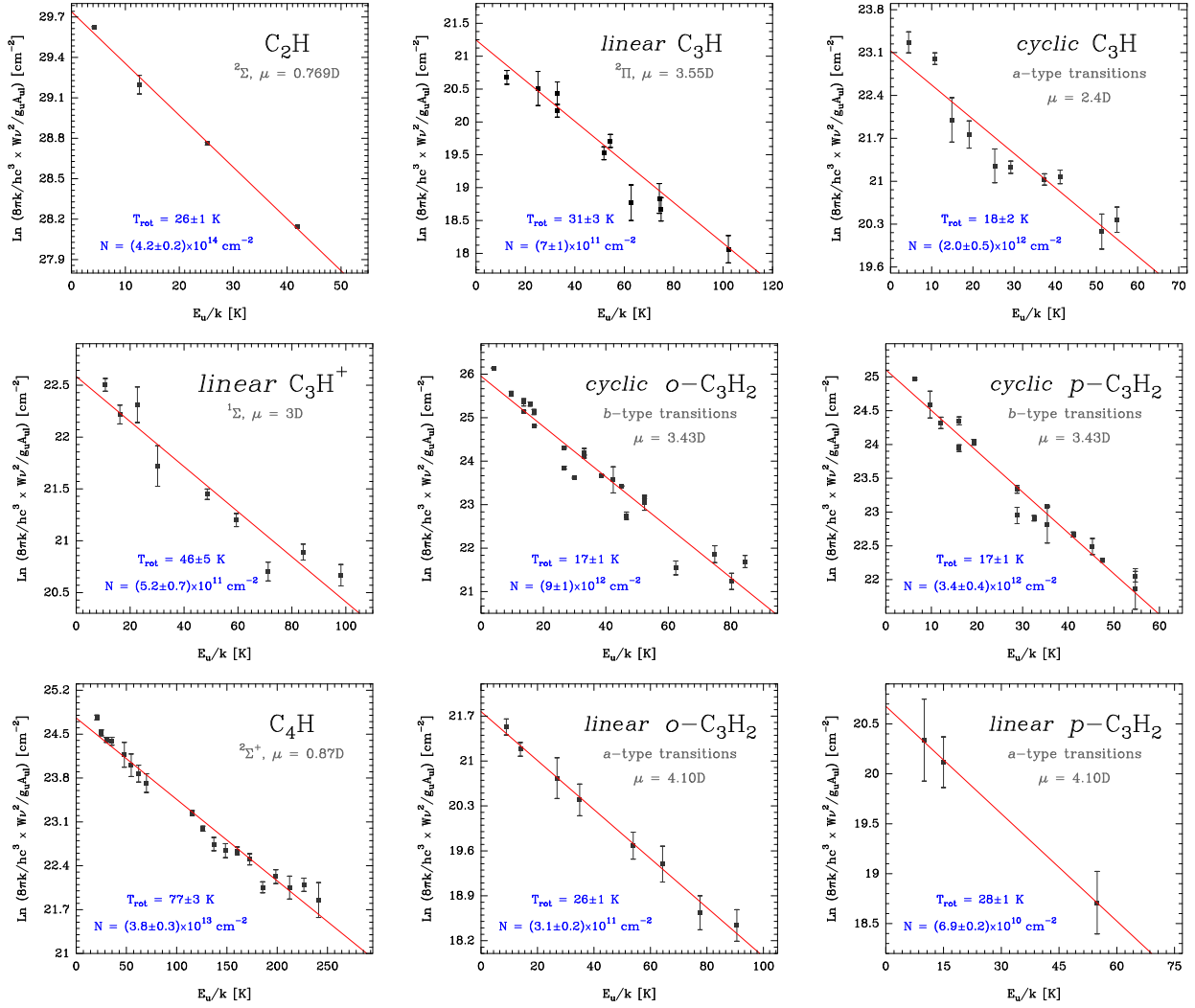


Fig. 12. Rotational diagrams of the detected hydrocarbon molecules in the Orion Bar PDR. Fitted values of the rotational temperature, T_{rot} , column density, N , and their respective uncertainties are also indicated for each molecule.

rotational temperatures of the cyclic species ($c\text{-C}_3\text{H}_2$ and $c\text{-C}_3\text{H}$) are smaller than their respective linear isomers ($l\text{-H}_2\text{C}_3$ and $l\text{-C}_3\text{H}$); (iii) we obtain similar rotational temperatures for the ortho and para forms of the same molecule; (iv) C_2H and C_4H have similar dipole moments and rotational spectroscopy, but show quite different rotational temperatures (26 K and 77 K, respectively). This low temperature for C_2H means that in the millimetre domain we detect the warm C_2H (containing most of the column density), but not the hotter C_2H recently detected by *Herschel*/HIFI (higher energy transitions from $N = 6 \rightarrow 5$ to $10 \rightarrow 9$; see Nagy et al., in prep.). We estimate that this hotter C_2H only contributes to $\sim 5\%$ of the total C_2H column. The rotational temperature deduced for C_4H will be discussed in Sect. 7.1.

5.3. Spatial variation of the C_2H and $c\text{-C}_3\text{H}_2$ abundance

In order to investigate the C_2H and $c\text{-C}_3\text{H}_2$ column density and abundance variations along the Orion Bar, we reprojected the 3 mm and 1 mm IRAM 30 m maps to a common grid. We selected two representative positions, one towards the line survey

position at the PDR dissociation front (near the C_2H $N = 3 \rightarrow 2$ line emission peak) and the other deeper inside the cloud where the C_2H $N = 1 \rightarrow 0$ line peaks, that we call the molecular peak. This latter position coincides with the dense clump/condensation No. 10 detected by Lis & Schilke (2003) in H^{13}CN $J = 1 \rightarrow 0$ emission. We extracted the C_2H and $c\text{-o-C}_3\text{H}_2$ column densities towards these two positions by constructing reduced rotational diagrams with the line intensities extracted from the maps. Figure 13 shows the C_2H ($N = 1 \rightarrow 0$ and $3 \rightarrow 2$) and $c\text{-o-C}_3\text{H}_2$ ($J_{K_a, K_c} = 2_{1,2} \rightarrow 1_{0,1}$ and $5_{1,4} \rightarrow 4_{2,3}$) spectra towards the two selected positions. The dark blue spectrum shows the emission in the PDR dissociation front and the light blue spectrum shows the emission deeper inside the cloud. Table 5 shows the C_2H and $c\text{-o-C}_3\text{H}_2$ rotational temperatures and column densities towards the two positions. Close to the dissociation front, where the gas is hotter, the inferred rotational temperatures are higher. Despite the similar C_2H and $c\text{-o-C}_3\text{H}_2$ column densities towards both positions, the N_{H} column density towards the cloud edge is necessarily smaller than towards clump/condensation No. 10. This is readily seen in C^{18}O line maps that show the brightest emission towards the molecular peak position deeper inside the

A&A 575, A82 (2015)

Table 4. Rotational temperatures (T_{rot}), column densities ($N(X)$), and abundances with respect to hydrogen nuclei inferred in the Orion Bar PDR.

	Extended source		Semi-extended source		Abundance	Notes
	T_{rot} [K]	$N(X)$ [cm ⁻²]	T_{rot} [K]	$N(X)$ [cm ⁻²]		
C ₂ H	26 ± 1	(4.2 ± 0.2) × 10 ⁺¹⁴	12 ± 3	(1.7 ± 0.7) × 10 ⁺¹⁵	(0.7–2.7) × 10 ⁻⁸	^a
¹³ CCH	26	3.0 × 10 ⁺¹²	12	4.6 × 10 ⁺¹²	(4.8–7.3) × 10 ⁻¹¹	^b
C ¹³ CH	26	4.2 × 10 ⁺¹²	12	6.5 × 10 ⁺¹²	(0.7–1.0) × 10 ⁻¹⁰	^b
<i>c</i> -C ₃ H	18 ± 2	(2.0 ± 0.5) × 10 ⁺¹²	11 ± 1	(9.9 ± 3.5) × 10 ⁺¹²	(0.3–1.6) × 10 ⁻¹⁰	^a
<i>l</i> -C ₃ H	31 ± 3	(7.0 ± 1.1) × 10 ⁺¹¹	20 ± 2	(3.4 ± 0.9) × 10 ⁺¹²	(1.1–5.4) × 10 ⁻¹¹	^a
<i>l</i> -C ₃ H ⁺	46 ± 5	(5.2 ± 0.7) × 10 ⁺¹¹	25 ± 3	(2.5 ± 0.6) × 10 ⁺¹²	(0.8–4.0) × 10 ⁻¹¹	^a
<i>c-o</i> -C ₃ H ₂	17 ± 1	(9.4 ± 1.3) × 10 ⁺¹²	15 ± 1	(4.1 ± 1.3) × 10 ⁺¹³	(1.5–6.5) × 10 ⁻¹⁰	^a
<i>c-p</i> -C ₃ H ₂	17 ± 1	(3.4 ± 0.4) × 10 ⁺¹²	11 ± 1	(1.8 ± 0.5) × 10 ⁺¹³	(0.5–2.9) × 10 ⁻¹⁰	^a
[<i>c-(o+p)</i> -C ₃ H ₂]	–	(1.3 ± 0.2) × 10 ⁺¹³	–	(5.9 ± 0.9) × 10 ⁺¹³	(2.1–9.4) × 10 ⁻¹⁰	^c
<i>l-o</i> -C ₃ H ₂	26 ± 1	(3.1 ± 0.2) × 10 ⁺¹¹	17 ± 1	(1.9 ± 0.4) × 10 ⁺¹²	(0.5–3.0) × 10 ⁻¹¹	^a
<i>l-p</i> -C ₃ H ₂	28 ± 1	(6.9 ± 0.2) × 10 ⁺¹⁰	15 ± 1	(4.0 ± 0.8) × 10 ⁺¹¹	(1.1–6.4) × 10 ⁻¹²	^a
[<i>l-(o+p)</i> -C ₃ H ₂]	–	(3.8 ± 0.2) × 10 ⁺¹¹	–	(2.3 ± 0.5) × 10 ⁺¹²	(0.6–3.7) × 10 ⁻¹¹	^c
C ₄ H	77 ± 3	(3.8 ± 0.3) × 10 ⁺¹³	49 ± 3	(2.0 ± 0.3) × 10 ⁺¹⁴	(0.6–3.2) × 10 ⁻⁹	^a

Notes. ^(a) Rotational temperatures and column densities from rotational diagram analysis. ^(b) Column densities derived from a LTE model assuming $T_{\text{rot}} = 26$ K for extended source and $T_{\text{rot}} = 12$ K for semi-extended source. ^(c) Total column densities calculated as the sum of the ortho and para species. The abundance of each species with respect to H nuclei is given by $\frac{N(X)}{N_{\text{H}}} = \frac{N(X)}{N(\text{H})+2N(\text{H}_2)}$, with $N(\text{H}_2) \approx 3 \times 10^{+22}$ cm⁻² (see Sect. 5.2) and $N(\text{H}) \approx 3 \times 10^{+21}$ cm⁻² (van der Werf et al. 2013).

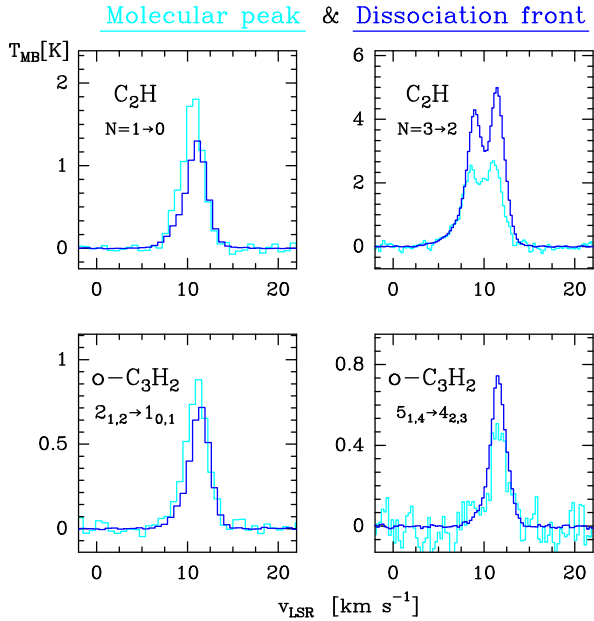


Fig. 13. C₂H (upper panels) and *c*-C₃H₂ (lower panels) spectra towards two different positions in the Orion Bar: one in the dissociation front where we have carried out a line survey (dark blue spectrum), and the other towards clump No. 10 of Lis & Schilke (2003) that we call the molecular peak (light blue spectrum). The spectra towards the molecular peak were extracted from the 1 mm and 3 mm reprojected maps.

Bar and a faint emission level towards the dissociation front (e.g. van der Wiel et al. 2009; Cuadrado et al., in prep.). The variation of the C₂H and *c-o*-C₃H₂ abundances can then be estimated using $N_{\text{H}} \approx 3.3 \times 10^{+22}$ cm⁻² towards the dissociation front (see Sect. 5.2) and $N_{\text{H}} \approx 2.5 \times 10^{+23}$ cm⁻² towards clump No. 10 (the median column density inferred by Lis & Schilke 2003

Table 5. Rotational temperatures (T_{rot}), column densities ($N(X)$), and abundances of C₂H and *c-o*-C₃H₂ with respect to hydrogen nuclei inferred in the dissociation front (DF) and in the molecular peak (MP).

		T_{rot} [K]	$N(X)$ [cm ⁻²]	Abundance ^a
C ₂ H	DF	26 ± 1	(4.2 ± 0.2) × 10 ⁺¹⁴	~6.7 × 10 ⁻⁹
	MP	13 ± 2	(3.7 ± 0.6) × 10 ⁺¹⁴	~7.4 × 10 ⁻¹⁰
<i>c-o</i> -C ₃ H ₂	DF	17 ± 1	(9.4 ± 1.3) × 10 ⁺¹²	~1.5 × 10 ⁻¹⁰
	MP	11 ± 2	(1.2 ± 0.2) × 10 ⁺¹³	~2.4 × 10 ⁻¹¹

Notes. ^(a) With respect to H nuclei, using $N_{\text{H}} \approx 3.3 \times 10^{+22}$ cm⁻² (see Sect. 5.2) towards the dissociation front (DF) and $N_{\text{H}} \approx 2.5 \times 10^{+23}$ cm⁻² (Lis & Schilke 2003) towards the molecular peak (MP).

towards the dense H¹³CN clumps). This factor of ~10 difference is consistent with the expected increase of line-of-sight material with distance from the PDR edge to the density peak (d), and estimated as d^2 from detailed dust radiative transfer models (Arab et al. 2012). Therefore, the C₂H abundance with respect to hydrogen nuclei is higher towards the PDR edge (~10⁻⁸) than deeper inside the cloud (~10⁻⁹). *c*-C₃H₂ shows a similar trend and therefore both hydrocarbons show enhanced abundances towards the UV-illuminated edge of the cloud, but they are also moderately abundant in the more shielded cloud interior. Although higher angular resolution observations will be needed to accurately constrain the abundance gradients in more detail, we note that the [C₂H]/[*c*-C₃H₂] column density ratio decreases from the illuminated cloud edge to the cloud interior.

5.4. Non-LTE excitation analysis

In order to derive the beam-averaged physical conditions in the observed region we studied the non-LTE excitation of

S. Cuadrado et al.: The chemistry and spatial distribution of small hydrocarbons in UV-irradiated molecular clouds

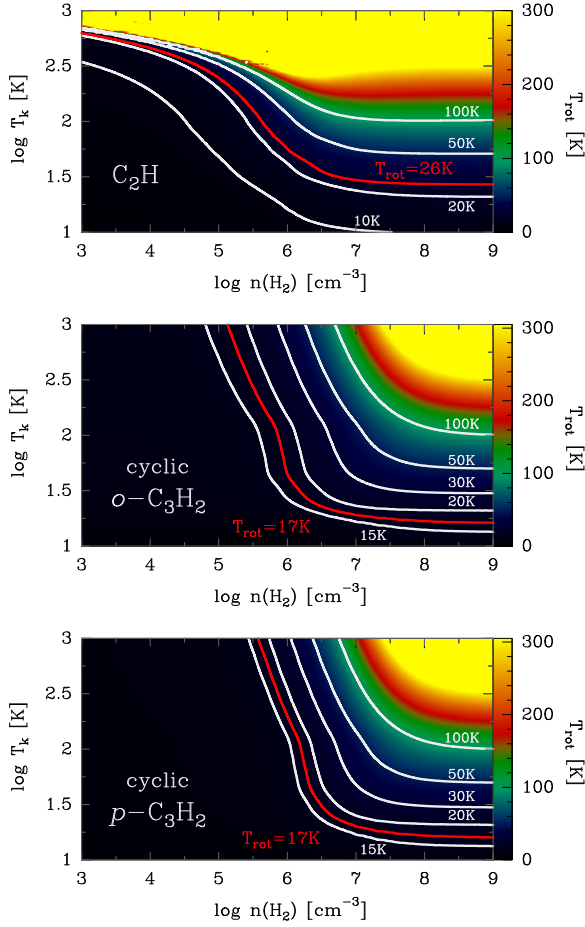


Fig. 14. Grid of C_2H , o - C_3H_2 , and p - C_3H_2 LVG models for different gas temperatures and densities. White contour levels represent iso-rotational temperatures. The red curves show the rotational temperature derived from our observations towards the survey position.

the C_2H and c - C_3H_2 molecules for which accurate collisional rates exist. We used C_2H -He collisional rates from Spielfiedel et al. (2012) and C_3H_2 -He from Chandra & Kegel (2000) for C_2H and c - C_3H_2 , respectively. A large grid of LVG models for a broad range of column densities, H_2 densities ($n(H_2) = 10^{3-9} \text{ cm}^{-3}$), and kinetic temperatures ($T_k = 10\text{--}1000 \text{ K}$) values were run to obtain synthetic line intensities for C_2H and cyclic o/p - C_3H_2 . The best fit models have column densities within a factor of 2 of the inferred value from the rotational diagram analysis (see Sect. 5.2). Hence, we used constant beam-averaged column densities for further analysis ($N(C_2H) = 4.2 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$, $N(c\text{-}o\text{-}C_3H_2) = 9.4 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, and $N(c\text{-}p\text{-}C_3H_2) = 3.4 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$). The C_2H models were fitted in the $N_{up} = 1$ to 5 transition range, and c - C_3H_2 models were fitted within the $J_{up} = 2\text{--}8$ range. We used $\Delta v = 2 \text{ km s}^{-1}$ line widths. Figure 14 shows the LVG model results in the form of iso- T_{rot} contours. Each T_{rot} was calculated by building rotational diagrams with the synthetic line intensities obtained from each model. Figure 14 shows that the T_{rot} inferred from our survey data (the red contours) can be obtained for different combinations of gas density ($n(H_2)$) and temperature (T_k).

In order to constrain accurately the range of physical conditions that reproduce the observed intensities towards the dissociation front, we compared the C_2H detected lines to the synthetic line intensities obtained in the grid of LVG models. We only used

the C_2H $N = 3 \rightarrow 2$ and $4 \rightarrow 3$ hyperfine components in the analysis as they were observed with higher angular and spectral resolution. In addition, the extended emission from OMC1 likely contributes to the observed 3 mm lines, both in amplitude and in line-broadening (see Sect. 5.1). Following Neufeld et al. (2014), the best fit model was obtained by finding the minimum root mean square (rms) value of $\log_{10}(I_{obs}/I_{mod})$. This is defined as

$$\text{rms} = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left(\log_{10} \frac{I_{obs}^i}{I_{mod}^i} \right)^2}, \quad (4)$$

where n is the number of observed lines, I_{obs}^i is the observed line intensity calculated from Gaussian fits to the lines listed in Table B.1, and I_{mod}^i is the model line intensity using MADEX.

Figure 15 (left) represents the $\text{rms}_{min}/\text{rms}$ ratio as a function of T_k and $n(H_2)$ for a grid of excitation models trying to fit the C_2H $N = 3 \rightarrow 2$ and $4 \rightarrow 3$ lines towards the PDR position. The set of physical conditions that best fit the lines lie within $T_k = 150\text{--}250 \text{ K}$, $n(H_2) = (0.7\text{--}1.7) \times 10^5 \text{ cm}^{-3}$. Figure 15 (right) also shows the best fit C_2H model ($T_k \approx 150 \text{ K}$, $n(H_2) \approx 1.5 \times 10^5 \text{ cm}^{-3}$) overlaid over the observed lines. The computed opacities at line centre are $\tau < 0.1$. We note that the ^{12}CO line intensity peaks (T_{MB}^p ; in main beam temperature) towards the line survey position goes from $\sim 115 \text{ K}$ to $\sim 160 \text{ K}$ (for the $J = 1 \rightarrow 0$ and $3 \rightarrow 2$ lines, respectively). Since low- J ^{12}CO lines are optically thick ($W[^{12}CO\ 3 \rightarrow 2]/W[^{13}CO\ 3 \rightarrow 2] \approx 5$, much lower than the $^{12}C/^{13}C$ isotopic ratio of 60), their intensity peak provides a good lower limit to the gas temperature ($T_{MB}^p \lesssim T_{ex} \lesssim T_k$). Therefore, the temperatures inferred from C_2H and ^{12}CO are in good agreement and consistent with $T_k \approx 150 \text{ K}$. Nevertheless, the gas temperature and density in a PDR are expected to vary at spatial scales that cannot be resolved with our single-dish observations. Therefore, these values should be considered as the averaged conditions towards the Orion Bar dissociation front within a $\sim 30''\text{--}10''$ beam.

In the case of c -(o/p)- C_3H_2 , as shown in the plot of iso- T_{rot} (Fig. 14), the excitation of the millimetre lines provides a lower limit to the H_2 density of a few 10^5 cm^{-3} . The statistical analysis to obtain the best fit of the c -(o/p)- C_3H_2 lines was not conclusive because several sets of these two parameters fit the lines. However, for the physical conditions expected in the Orion Bar, the c - C_3H_2 lines do not exactly fit with the same physical conditions as C_2H . Slightly denser gas and a lower temperature are needed to obtain a satisfactory fit of c -(o/p)- C_3H_2 lines ($T_k \approx 100 \text{ K}$ and $n(H_2) \approx 4.0 \times 10^5 \text{ cm}^{-3}$; see Fig. 7). As we see later, this is roughly consistent with our chemical models (Sect. 6) which predict that the c - C_3H_2 abundance peaks slightly deeper inside the cloud than C_2H .

5.5. Undetected hydrocarbons

The broadband coverage of the Orion Bar survey allowed us to obtain upper limits for other chemically interesting carbon-bearing molecules that have not been detected in the PDR: longer carbon chains, anions, and deuterated isotopologues. In particular, we searched for C_2D , C_5H , C_6H , C_2H^- , C_4H^- , C_6H^- , H_2C_4 , and $C_2H_3^+$. First, we estimated 3σ line intensities using the relation (e.g. Coutens et al. 2012)

$$\int T_{MB} dv = 3\sigma \sqrt{2 \delta v \Delta v} \quad [K \text{ km s}^{-1}], \quad (5)$$

where σ is the rms of the observations [K], δv is the velocity-spectral resolution [km s^{-1}], and Δv is the assumed line widths

A&A 575, A82 (2015)

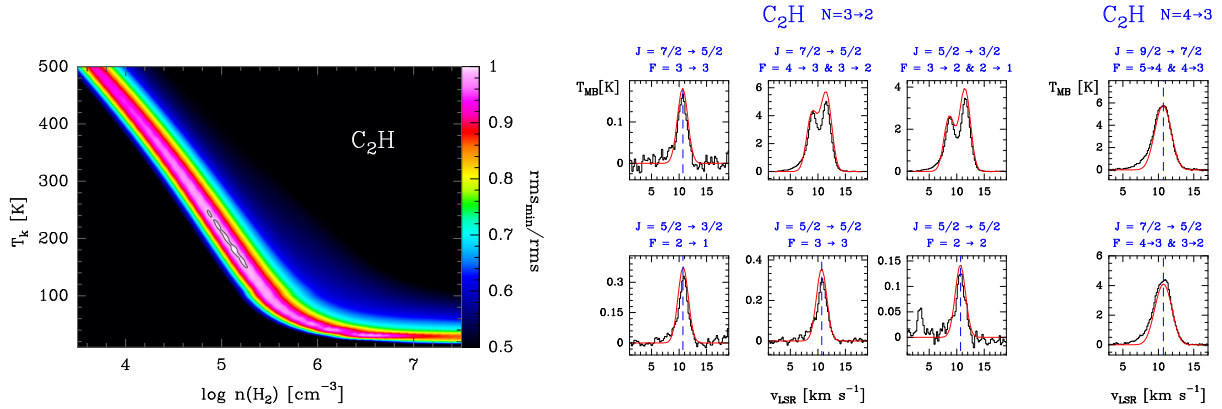


Fig. 15. Left panel: rms_{min}/rms ratio as a function of T_k and $n(\text{H}_2)$ for a grid of LVG models. The best fit models were obtained with $T_k = 150\text{--}250$ K and $n(\text{H}_2) = (0.7\text{--}1.7) \times 10^5 \text{ cm}^{-3}$. Right panel: observed C₂H $N = 3 \rightarrow 2$ and $4 \rightarrow 3$ spectra. The best fit LVG model ($T_k \approx 150$ K, $n(\text{H}_2) \approx 1.5 \times 10^5 \text{ cm}^{-3}$, and $N(\text{C}_2\text{H}) = 4.2 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$) is shown overlaid in red.

Table 6. Upper limits for undetected hydrocarbons.

Molecule	$N(X) [\text{cm}^{-2}]$	Abundance ^a
$p\text{-C}_2\text{H}_3^+$	$(1.8\text{--}2.0) \times 10^{+12}$	$(2.9\text{--}3.2) \times 10^{-11}$
C_2D	$(5.0\text{--}9.0) \times 10^{+11}$	$(0.8\text{--}1.4) \times 10^{-11}$
$(o+p)\text{-H}_2\text{C}_4$	$(2.5\text{--}2.8) \times 10^{+11}$	$(4.0\text{--}4.4) \times 10^{-12}$
C_6H	$(2.0\text{--}4.0) \times 10^{+11}$	$(3.2\text{--}6.4) \times 10^{-12}$
C_5H	$(1.5\text{--}2.0) \times 10^{+11}$	$(2.4\text{--}3.2) \times 10^{-12}$
C_6H^-	$(0.7\text{--}1.5) \times 10^{+11}$	$(1.1\text{--}2.4) \times 10^{-12}$
C_2H^-	$(2.0\text{--}3.0) \times 10^{+10}$	$(3.2\text{--}4.8) \times 10^{-13}$
C_4H^-	$(1.5\text{--}2.0) \times 10^{+10}$	$(2.4\text{--}3.2) \times 10^{-13}$

Notes. ^(a) The abundance of each species with respect to H nuclei is given by $\frac{N(X)}{N_H} = \frac{N(X)}{N(\text{H})+2N(\text{H}_2)}$, for $N(\text{H}_2) = 3 \times 10^{+22} \text{ cm}^{-2}$ (see Sect. 5.2) and $N(\text{H}) = 3 \times 10^{+21} \text{ cm}^{-2}$ (van der Werf et al. 2013).

($\sim 2 \text{ km s}^{-1}$). Second, we used MADEX to create LTE models to simulate the emission of different rotational lines at different frequencies of the same species and to constrain their column densities. The column densities and abundances 3σ upper limits for $T_{\text{rot}} = 20\text{--}30$ K are listed in Table 6.

Despite some controversy about their presence in PDRs (see e.g. Fortenberry et al. 2013), hydrocarbon anions are not detected at the sensitivity level of our line survey. We provide the following abundance ratio limits: $[\text{C}_2\text{H}^-]/[\text{C}_2\text{H}] < 0.007\%$ and $[\text{C}_4\text{H}^-]/[\text{C}_4\text{H}] < 0.05\%$. They agree with previous unsuccessful anion searches in other interstellar environments (e.g. Agúndez et al. 2008b).

6. PDR models of the Orion Bar

To investigate whether the inferred hydrocarbon column densities and spatial distribution agree with our current understanding of their gas-phase chemical formation, we have used an updated version of the Meudon code for photochemical studies (Le Petit et al. 2006; Le Boulbot et al. 2012). This 1D PDR model solves the FUV radiative transfer in an absorbing and diffusing medium of gas and dust (Goicoechea & Le Boulbot 2007). This allows the explicit computation of the FUV radiation field (continuum+lines) and, therefore, the explicit integration of self-consistent photoionisation and photodissociation rates as

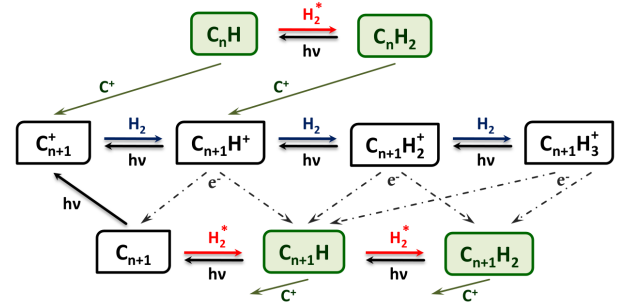


Fig. 16. Scheme with the main gas-phase formation and destruction reactions of small hydrocarbons predicted by our model of the Orion Bar PDR at $A_V \approx 1.5$ (close to their abundance peak). Reactions with activation energy barriers are indicated with red arrows. The blue arrows are barrierless hydrogenation reactions.

a function of cloud depth. The model also solves the thermal balance (see Le Petit et al. 2006) and thus the thermal profile through the PDR. Once the attenuation of the FUV radiation field and the temperature profile have been determined, steady-state chemical abundances are computed for a given chemical reaction network.

Our network contains ~ 130 species and ~ 2800 gas-phase reactions. It includes the formation of carbon bearing molecules up to four carbon atoms. In our models we adopt a FUV radiation field $\chi = 2 \times 10^4$ times the mean interstellar radiation field (ISRF) in Draine units (e.g. Marconi et al. 1998). When available, we used photodissociation rates given by van Dishoeck & Black (1988) and van Dishoeck et al. (2006; multiplied by χ), which are explicitly calculated for the Draine interstellar radiation field (ISRF). State-to-state reactions of vibrationally excited H_2 with C^+ , O, or OH are explicitly treated (see Agúndez et al. 2010). We have further upgraded the carbon-bearing species network and used the most recent branching ratios for ion-molecule, neutral-neutral, dissociative recombination, and charge exchange reactions for carbon chains and hydrocarbon species described in Chabot et al. (2013). Reactions of hydrocarbon radicals with H and H_2 are also included in the model (see e.g. Cernicharo 2004; Agúndez et al. 2008a). Figure 16 shows the dominant gas-phase formation and destruction routes of hydrocarbons predicted by our PDR models of the Orion Bar close to their abundance peak (at $A_V \approx 1.5$, see below).

S. Cuadrado et al.: The chemistry and spatial distribution of small hydrocarbons in UV-irradiated molecular clouds

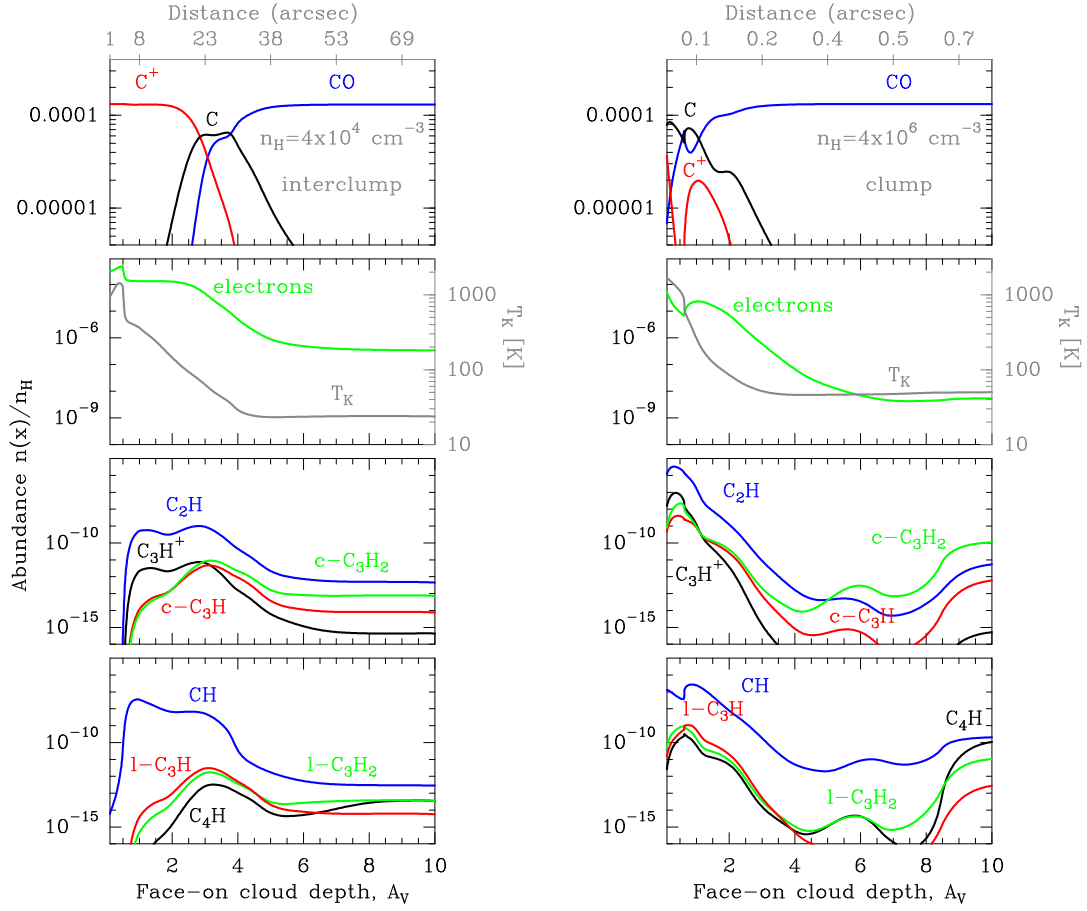


Fig. 17. Constant density, photochemical models as a function of cloud visual extinction (A_V) for $\chi = 2 \times 10^4$. *Left:* $n_H = 4 \times 10^4 \text{ cm}^{-3}$ characteristic of a moderate density interclump medium; *right:* $n_H = 4 \times 10^6 \text{ cm}^{-3}$ characteristic of higher density clumps. We note the different spatial scales, thermal profile, and molecular abundance and ionisation fraction gradients implied by the two models.

We also included the freeze-out of molecular and atomic species at different cloud depths. In our models ice mantles can desorb thermally and non-thermally (FUV-induced), but we do not contemplate grain surface chemistry. Given the high FUV radiation field and thus grain temperatures in the Orion Bar PDR ($T_d \approx 50\text{--}70 \text{ K}$; Arab et al. 2012), the less volatile species (e.g. H_2O) start to be affected by freeze-out beyond the PDR surface ($A_V > 5$; e.g. Hollenbach et al. 2009). The adopted elemental abundances are those of Goicoechea et al. (2006). We adopted a cosmic-ray ionisation-rate (ζ_{CR}) of 10^{-16} s^{-1} , but we note that the total ionisation rate in the Orion Bar might be higher if one includes the X-ray ionisation effects produced by all X-ray stellar sources in the Trapezium cluster (e.g. Gupta et al. 2010).

In order to guide the interpretation of our observations, we ran two types of PDR models that have been proposed to reproduce the physical conditions in the Orion Bar: constant density and isobaric models. We first ran models with constant hydrogen nuclei density in which the thermal pressure decreases from the illuminated cloud edge to the cloud interior: an interclump medium with $n_H = 4 \times 10^4 \text{ cm}^{-3}$ and a denser clump component with $n_H = 4 \times 10^6 \text{ cm}^{-3}$ (see Andree-Labsch et al. 2014, for more complicated descriptions). Figure 17 shows the physical and chemical stratification seen in the PDR ($\text{C}^+/\text{C}/\text{CO}/\dots$) is only compatible with the presence of a moderate density interclump medium. The physical gradients in the denser clump

model occur in much smaller scales (that cannot be resolved with the IRAM 30 m) but produce enhanced columns of several species. Hence, an ensemble of low filling factor embedded clumps or dense gas structures may be responsible for some chemical signatures that we see averaged in our observations.

Alternatively, isobaric models (with $P \approx 10^8 \text{ K cm}^{-3}$), in which the gas density naturally increases from a few $\sim 10^4 \text{ cm}^{-3}$ in the cloud edge to a few $\sim 10^6 \text{ cm}^{-3}$ in the interior, have been recently invoked to explain the CH^+ , OH^+ and high- J CO lines detected by *Herschel* (Nagy et al. 2013; van der Tak et al. 2013; Joblin et al., in prep.). A high thermal pressure model of this kind is shown in Fig. 18. In the following we restrict our discussion and model predictions for the observed hydrocarbon molecules.

6.1. Gas-phase formation of small hydrocarbons

Figure 18 shows model results for the $P \approx 10^8 \text{ K cm}^{-3}$ isobaric model that we take as our reference model. For such a highly UV-illuminated PDR, the first step of the gas-phase carbon chemistry is the $\text{H}_2 + \text{C}^+ \rightarrow \text{CH}^+ + \text{H}$ reaction, which becomes faster than the $\text{H}_2 + \text{C}^+ \rightarrow \text{CH}_2^+ + \text{photon}$ radiative association. The first reaction is endothermic by $E/k \approx 4300 \text{ K}$. Hot gas (a few hundred K) and/or the presence of (FUV pumped) vibrationally excited H_2 are needed to overcome the reaction endothermicity (e.g. Black & van Dishoeck 1987; Agúndez et al. 2010). Such conditions apply to the edge of the Orion Bar, as

A&A 575, A82 (2015)

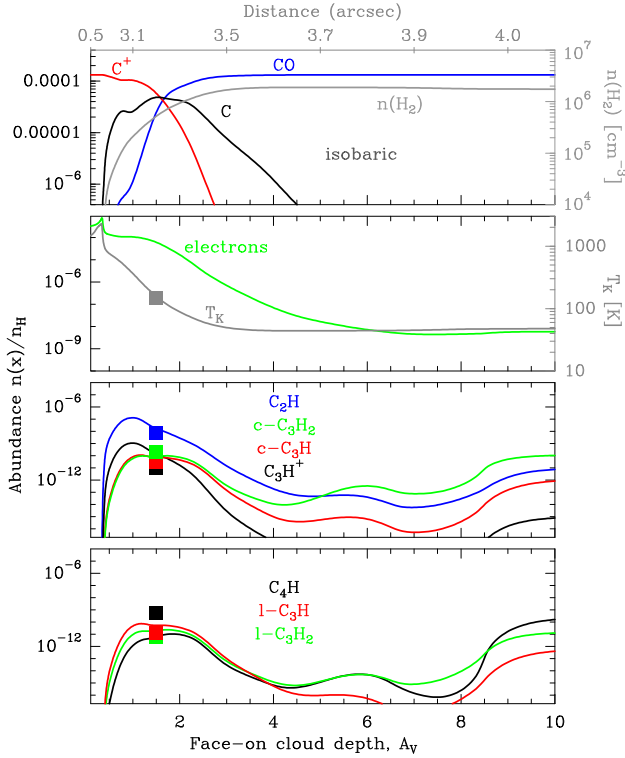


Fig. 18. Reference isobaric photochemical model for the Orion Bar with $P = 10^8 \text{ K cm}^{-3}$ and $\chi = 2 \times 10^4$. We note the increase of $n(\text{H}_2)$ as the gas temperatures decreases. The grey square shows the beam-averaged gas temperature estimated from our millimetre observations ($T_K \approx 150 \text{ K}$), which corresponds to $A_V \approx 1.5$ in the model. The coloured squares show the beam-averaged abundances derived from the line survey.

demonstrated by the detection of rotationally excited CH^+ lines (see e.g. Habart et al. 2010; Nagy et al. 2013). The presence of significant amounts of CH^+ produces enhanced abundances of CH_2^+ and CH_3^+ ions by subsequent reactions with H_2 (barrierless reactions). These simple hydrocarbon ions recombine and form CH and CH_2 . In fact, CH^+ and CH show extended line emission in the entire Orion region (Goicoechea et al., in prep.) whereas CH^+ has not been detected in low FUV-flux field PDRs like the Horsehead (Teyssier et al., in prep.). The coexistence of CH radicals and C^+ in the surface of the PDR allows the formation of C_2^+ through the ion-neutral reaction $\text{CH} + \text{C}^+ \rightarrow \text{C}_2^+ + \text{H}$. This starts the chemistry of species containing two carbon atoms.

The C_2^+ ion reacts with H_2 to form C_2H^+ , C_2H_2^+ , and C_2H_3^+ by a series of successive barrierless hydrogenation reactions. Recombination of these ions with electrons form the abundant C_2 and C_2H neutrals. Figure 18 shows that most small hydrocarbons show a first abundance peak near the illuminated edge of the cloud where the predicted gas temperature sharply goes from $\sim 1000 \text{ K}$ in the cloud surface, close to the ionisation front, to $\sim 150 \text{ K}$ near the dissociation front at $A_V \approx 1.5$. Such elevated temperatures contribute to enhancing the abundance of C_2H through the $\text{C}_2 + \text{H}_2 \rightarrow \text{C}_2\text{H} + \text{H}$ reaction, which has an activation energy barrier of $E/k \approx 1500 \text{ K}$ (Pitts et al. 1982). For the physical conditions prevailing in the edge of Orion Bar, this neutral-neutral reaction dominates the gas-phase formation of abundant C_2H . For this reason, the gas-phase production of C_2H may be more efficient in dense and hot PDRs than in cool PDRs (we note the higher peak C_2H abundance in

the clump model compared to the interclump model in Fig. 17). Like CH^+ or CH , the highest C_2H abundances are predicted at the illuminated edge of the cloud. Reaction of C_2H with H_2 then forms acetylene, C_2H_2 . This reaction is also favoured at high temperatures (Baulch 2005). Since C^+ is the most abundant carbon-bearing species in the PDR edge, further reactions of C_2H with C^+ produce C_3^+ , that then reacts with H_2 to produce C_3H^+ (depending on the acetylene abundance, $\text{C}_2\text{H}_2 + \text{C}^+$ can also contribute to C_3H^+ formation). These are crucial intermediate precursors that form increasingly complex hydrocarbons. The chemistry of species containing three carbon atoms then proceeds. Reactions of C_3H^+ with H_2 produce the linear and cyclic forms of C_3H_2^+ and C_3H_3^+ isomers (e.g. Maluendes et al. 1993; McEwan et al. 1999). Dissociative recombination of these ions then produces the $c\text{-C}_3\text{H}_2$, $l\text{-H}_2\text{C}_3$, and $l\text{-}$ and $c\text{-C}_3\text{H}$ isomers (e.g. Fossé et al. 2001). The detection of $l\text{-C}_3\text{H}^+$ in the Horsehead (Pety et al. 2012) and Orion Bar, supports the above gas-phase routes for the synthesis of hydrocarbons containing several C atoms in UV-illuminated gas (i.e. with available C^+). We note that in the hydrocarbon abundance peak, their destruction is dominated by photodissociation (e.g. for C_2H and $c\text{-C}_3\text{H}_2$ producing C_2 , C_3 , and $c\text{-C}_3\text{H}$, respectively, see Fig. 16).

Although not all chemical rates and branching ratios involving hydrocarbons are known with precision, the Orion Bar is a good laboratory for testing this scheme (Fig. 16) because (i) large column densities of C^+ exist; (ii) the electron density is high enough to make recombination reactions efficient; and (iii) the gas temperature is high enough to activate the barriers of reactions involving neutral carbon-bearing molecules with H and H_2 .

For the physical conditions prevailing in the Orion Bar, the gas temperature and ionisation fraction (the electron abundance or x_e) significantly drops at cloud depths larger than $A_V \approx 4$. At these depths, most of the carbon becomes locked in CO and not in C^+ or C . This modifies the hydrocarbon chemistry. Even deeper inside the cloud, molecules and atoms start to freeze-out so the exact abundances of small hydrocarbons in cloud interiors are more uncertain. In particular, they critically depend on x_e , which determines the abundance of hydrocarbon ion precursors (see also Fossé et al. 2001). The ionisation fraction in UV-shielded gas is set by the cosmic-ray ionisation-rate and by the poorly known gas-phase abundance of low ionisation metals like Fe that carry most of the positive charge (see Goicoechea et al. 2009, for the Horsehead). The chemical time-scales become much longer than in the illuminated cloud edge and time-dependent effects are expected to be important (Hollenbach et al. 2009; Pilleri et al. 2013). Our reference isobaric model predicts that the hydrocarbon abundances peak again at $N_{\text{H}}(\text{face-on}) \gtrsim 9 \times 10^{21} \text{ cm}^{-2}$. This is consistent with the detection of hydrocarbons in dark clouds (Fossé et al. 2001) and with the spatial distribution of the low energy C_2H and $c\text{-C}_3\text{H}_2$ lines in our maps (peaking beyond the PDR, Fig. 10).

At least qualitatively, the abundances of small hydrocarbons beyond the cloud edge increase if x_e decreases. The ionisation fraction in a cloud interior can be low if the metallicity (Fe, etc.) is low or if the gas density is high ($x_e \propto \sqrt{\zeta_{\text{CR}}/n_{\text{H}}}$; see the different x_e gradients and resulting hydrocarbon abundances at large cloud depths in the models shown in Fig. 17). Finally, x_e can also be low if significant abundances ($\gtrsim 10^{-7}$) of negatively charged species exist (PAH, grains, or other large molecules to which electrons could easily attach). This of course is far from being proven and is still controversial. In such a case, the abundances of hydrocarbons like $c\text{-C}_3\text{H}_2$ are expected to increase by large factors (e.g. Lepp & Dalgarno 1988; Goicoechea et al. 2009).

S. Cuadrado et al.: The chemistry and spatial distribution of small hydrocarbons in UV-irradiated molecular clouds

Table 7. Observed and best isobaric PDR model column densities.

	Observed	Model ^a
	$\log_{10}(N)$	$\log_{10}(N)$
	[cm ⁻²]	[cm ⁻²]
C ₂ H	14.6	14.1 ^b –14.8 ^c
<i>l</i> -C ₃ H ⁺	11.7	12.0 ^b –12.7 ^c
<i>c</i> -C ₃ H ₂	13.1	12.2 ^b –12.9 ^c
<i>l</i> -H ₂ C ₃	11.6	11.3 ^b –12.0 ^c
<i>c</i> -C ₃ H	12.3	11.3 ^b –12.0 ^c
<i>l</i> -C ₃ H	11.8	11.1 ^b –11.9 ^c
C ₄ H	13.6	12.3 ^b –13.1 ^c

Notes. ^(a) Isobaric model with $P = 10^8$ K cm⁻³ and $\chi = 2 \times 10^4$. Column densities integrated up to $N(\text{H}_2)(\text{face-on}) \approx 10^{22}$ cm⁻². ^(b) Face-on configuration. ^(c) Column densities for an inclination angle of $\alpha \approx 11^\circ$ with respect to an edge-on geometry.

6.2. Comparison with observations

Because the Orion Bar does not have a perfect edge-on orientation, comparison of unidimensional PDR models and observations requires (i) a knowledge of the inclination angle α with respect to a pure edge-on configuration and (ii) knowledge of the equivalent face-on cloud depth (as in 1D models) of the observed line of sight, $N_{\text{H}}(\text{face-on}) = N_{\text{H}}(\text{observed}) \times \sin \alpha$. Different estimations have constrained the inclination angle to a maximum value of 15° (see discussion by Melnick et al. 2012, and references therein). This means a geometric column density enhancement of ≥ 4 with respect to a pure face-on PDR model predictions.

Table 7 lists the column densities inferred from our observations towards the PDR survey position and the column densities predicted by the reference isobaric model ($P = 10^8$ K cm⁻³) integrated from $N(\text{H}_2)(\text{face-on}) \approx 0$ to 10^{22} cm⁻² and for two different inclinations (face-on and $\alpha \approx 11^\circ$). We note that for the reference model with $\alpha \approx 11^\circ$, the face-on extinction $A_V \approx 10$ is equivalent to an angular scale $\sim 4''/\sin 11^\circ \approx 20''$ at the distance of the Orion Bar PDR (see Fig. 18), roughly the average beam of our millimetre observations.

In this range of values, the match between observations and our reference models is reasonably good. In particular, the column densities of all small hydrocarbons can be reproduced within factors of < 3 . The predicted variation of selected hydrocarbon abundance ratios with cloud depth (decreasing FUV field) is shown in Fig. 19. Taking the column density of *l*-C₃H as a reference (the model matches the observed value and this molecule is expected to show enhanced abundances in high x_e environments; see Fossé et al. 2001) the PDR model also reproduces the observed $[\text{C}_2\text{H}]/[\text{l-C}_3\text{H}]$, $[\text{c-C}_3\text{H}_2]/[\text{l-C}_3\text{H}]$, and $[\text{l-H}_2\text{C}_3]/[\text{l-C}_3\text{H}]$ column density ratios within a factor of 2. Nevertheless, the column density of other species, C₄H in particular, is underestimated by a factor of 3 in the reference model, showing that the agreement is clearly not perfect. Still, given the complexity of the region and the geometrical simplicity of our models, this is much better than the order-of-magnitude differences reported between observations and models of low FUV-flux PDRs like the Horsehead (Pety et al. 2005, 2012). In this PDR, photo-destruction of PAHs or very small grains (VSGs) has been invoked to dominate the production of hydrocarbons like C₂H or *c*-C₃H₂. In the Orion Bar, the FUV flux is much higher and our model results suggest that photochemical models can explain the observed C₂H, C₃H, and C₃H₂ column

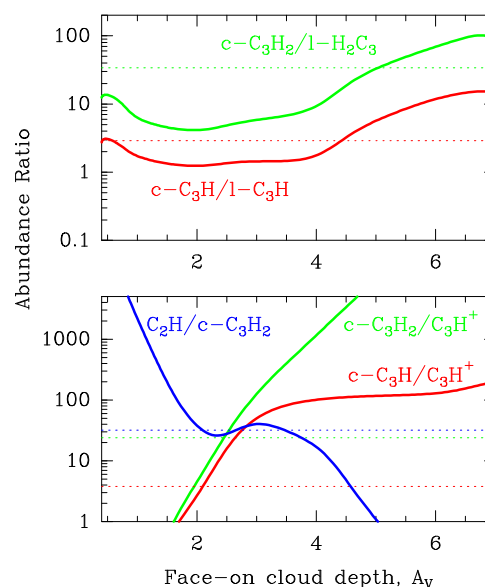


Fig. 19. Reference isobaric photochemical model for the Orion Bar with $P = 10^8$ K cm⁻³ and $\chi = 2 \times 10^4$ showing selected hydrocarbon abundance ratios as a function of A_V . The dashed horizontal lines show the ratios derived from the line survey.

densities without invoking a major contribution of PAH photodestruction. This conclusion would agree with the different spatial distributions of the PAHs and the C₂H and *c*-C₃H₂ emission seen along the Orion Bar. An important difference compared to the diffuse clouds or low UV-flux PDRs like the Horsehead is the much higher temperature attained by the gas and the elevated abundances of vibrationally excited H₂ activating many neutral-neutral reactions that likely play a minor role in the Horsehead or in diffuse clouds (see also Sect. 7.4).

For the more complex hydrocarbons (i.e. those with more than three carbon atoms), however, steady-state gas-phase models do not provide an entirely satisfactory fit. Time-dependent photochemical models, such as those applied to C-rich protoplanetary nebulae (e.g. Cernicharo 2004) show that the steady-state abundances of several organic species are different from those obtained during the gas time evolution. Hence, they may fit some specific hydrocarbons better despite the short time-scales in PDRs.

7. Discussion

7.1. Rotationally hot C₄H and *l*-C₃H⁺

The rotational population analysis presented in Sect. 5.2 shows that C₄H, and to a lesser extent *l*-C₃H⁺, have unusually high rotational temperatures compared to other small hydrocarbon molecules detected in the millimetre domain. This is more clearly seen in C₄H, which has a similar dipole moment and rotational spectroscopy to C₂H but shows much higher rotational temperatures ($T_{\text{rot}} \approx 77$ K versus 26 K). The C₄H radical has a complicated vibronic spectroscopy due to the proximity of the degenerated ²Π excited electronic state (with a much higher 4.3 Debye dipole moment) only ~ 300 K above the X²Σ⁺ ground state. The Renner-Teller effect, spin-orbit interactions, and other couplings complicate the low energy rovibronic structure of C₄H (see e.g. Senent & Hochlaf 2010; Mazzotti et al. 2011). We suspect that radiative pumping contributes to the excitation of the

A&A 575, A82 (2015)

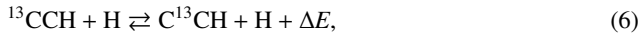
lowest lying bending modes of C_4H . Indeed, the derived rotational temperature for C_4H , $T_{\text{rot}} \approx 77$ K, is very similar to the dust temperature inferred towards the edge of the Orion Bar PDR (Arab et al. 2012). Therefore, it is plausible that the absorption of IR continuum photons from warm grains heated by the strong FUV-radiation field contributes to the C_4H excitation. In this context, the inferred T_{rot} would be more representative of the dust grain temperature in the PDR edge than of the gas temperature. The low energy modes of C_4H have been detected in the circumstellar envelope around the carbon-rich star IRC+10216 (Guelin et al. 1987). However, we have not detected rovibrational lines from the lowest energy C_4H bending mode, ν_7 (Yamamoto et al. 1987a) probably due to the limited sensitivity of our line survey. The upper limit C_4H [ν_7]/[$\nu = 0$] < 10% column density ratio we derive, however, is relatively high.

In Sect. 3.2.1 we concluded that $I-C_3H^+$ is a floppy molecule that very likely has low lying bending modes. Although we have not detected lines with their expected spectroscopic pattern, these levels can also be populated at relatively low gas temperatures through IR pumping. The $I-C_3H^+$ ion is a high dipole-moment molecule and, for the physical conditions in the Orion Bar PDR, its rotational levels are expected to be subthermally excited ($T_{\text{ex}} \ll T_k$). However, $T_{\text{rot}}(I-C_3H^+) \approx 46$ K is significantly higher⁵ than the rotational temperatures inferred for all the other small hydrocarbons molecules (except C_4H). Again, this is an indication that IR pumping likely affects the $I-C_3H^+$ excitation.

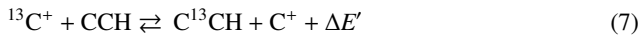
7.2. Fractionation of $C^{13}CH$ and ^{13}CCH isotopomers

The inferred $[C^{13}CH]/[^{13}CCH] = 1.4 \pm 0.1$ (3σ) column density ratio towards the Orion Bar implies differential ^{13}C fractionation of CCH isotopologues. Sakai et al. (2010) also observed both isotopomers towards the dark cloud TMC-1 and the star-forming core exhibiting warm carbon-chain chemistry L1527. They derived $[C^{13}CH]/[^{13}CCH] = 1.6 \pm 0.4$ and 1.6 ± 0.1 , respectively.

Furuya et al. (2011) suggested that the observed fractionation in cold and dense gas could be explained by the isotopomer exchange reaction



where $\Delta E \approx 8$ K is the difference between the zero point energy (ZPE) of $C^{13}CH$ and ^{13}CCH (see also Tarroni & Carter 2003). Compared to a dark cloud, the Orion Bar shows different physical conditions driven by the presence of a strong UV radiation field: a large C^+ abundance, a higher fraction of H atoms with respect to H_2 , and much more elevated gas temperatures. In the warm PDR gas, and in the absence of an activation barrier (suggested by Furuya et al. 2011), reaction (6) will not enhance the $C^{13}CH$ abundance significantly above $C^{13}CH$ (by only ~5% at ~150 K). Therefore, in addition to reaction (6), we suggest that reactions



⁵ The $T_{\text{rot}}(I-C_3H^+) = 178(3)$ K value inferred by McGuire et al. (2014) from their observation of the $J = 9 \rightarrow 8$, $10 \rightarrow 9$, and $11 \rightarrow 10$ lines is significantly higher than the value we obtain from our multi-line observations with the IRAM 30 m telescope. The presence of significant $I-C_3H^+$ emission dilution in the larger CSO telescope beam (HPBW_{CSO}[arcsec] $\approx 7000/\text{Frequency[GHz]}$, Mangum 1993) would lead to apparently larger values of T_{rot} if beam dilution is not corrected. In particular, we compute that a $I-C_3H^+$ emission source size of $\theta_s \lesssim 17''$ (leading to a beam dilution of $\eta_{\text{bt}}(\text{CSO}) \lesssim 0.23$ at ~225 GHz) reconciles both data sets.

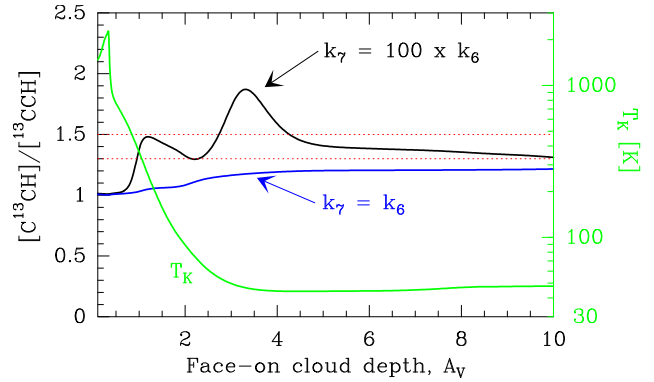
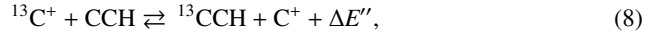
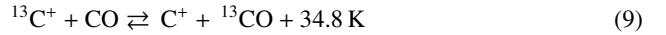


Fig. 20. Reference isobaric photochemical model for the Orion Bar with $P = 10^8$ K cm⁻³ and $\chi = 2 \times 10^4$. ^{13}C fractionation reactions have been included to explain the observed $[C^{13}CH]/[^{13}CCH]$ ratio (shown in the region enclosed by the red dashed lines). The black curve shows a model in which the rate of the $^{13}C^+ + CCH$ reaction is 100 times higher than that of the $^{13}CCH + H$ reaction (see text).

and



can contribute to the differential fractionation of $C^{13}CH$ and ^{13}CCH . Both isotopomers have relatively high ZPE differences with respect to CCH ($\Delta E' \approx 63$ K and $\Delta E'' \approx 55$ K, respectively) and both reactions (7) and (8) are more endothermic in the backward direction than reaction (6). We note that in a high UV-flux PDR, the gas temperature is high enough to prevent significant $^{13}C^+$ depletion through the reaction



(see Ossenkopf et al. 2013, for low $[C]/[^{13}C]$ line intensity ratios towards the Orion Bar). Owing to the higher H atom abundance in PDRs, reaction (7) needs to be faster (e.g. forming $C^{13}CH$) than the backward isotopomer exchange reaction (6) (e.g. destroying $C^{13}CH$). Figure 20 shows our reference isobaric model in which ^{13}C fractionation reactions involving $^{13}C^+$, ^{13}CO , and $H^{13}CO^+$ have been included (see Langer et al. 1984; Le Bourlot et al. 1993). The blue curve shows the predicted depth-dependent $[C^{13}CH]/[^{13}CCH]$ abundance ratio in a model with the same rate for reactions (6)–(8). In this model, the exchange reactions with H atoms dominate and $C^{13}CH$ only fractionates at large cloud depths (by ~20% at ~50 K) where the gas temperature significantly decreases. The black curve shows a model with $k_7 = k_8 = 100 \times k_6$. In this model, fractionation reactions with $^{13}C^+$ can dominate in the warm UV-illuminated gas and the $[C^{13}CH]/[^{13}CCH]$ ratio already increases at the cloud surface (becoming compatible with our observations). We note, however, that reaction (6) must always be present, otherwise the $[C^{13}CH]/[^{13}CCH]$ ratio will be much higher than the observed value as the gas temperature decreases. Quantum calculations and/or laboratory experiments are needed to constrain the reaction rates and potential energy activation barriers of these processes in detail.

7.3. Cyclic versus linear isomers

The linear and cyclic isomers of a given hydrocarbon species can have different behaviours with respect to neutral-neutral and ion-neutral reactions, and thus with respect to different physical conditions. Fossé et al. (2001) reported high $[c-C_3H_2]/[l-H_2C_3]$ (~28) and $[c-C_3H]/[l-C_3H]$ (~13) abundance ratios towards the

S. Cuadrado et al.: The chemistry and spatial distribution of small hydrocarbons in UV-irradiated molecular clouds

cyanopolyne peak in the cold dark cloud TMC-1. These ratios are higher than those observed in diffuse and translucent clouds: $[c\text{-C}_3\text{H}_2]/[l\text{-H}_2\text{C}_3] \approx (3\text{--}5)$ (Cernicharo et al. 1999) and $[c\text{-C}_3\text{H}]/[l\text{-C}_3\text{H}] \approx 2$ (Turner et al. 2000). Teyssier et al. (2005) showed that the cyclic-to-linear C_3H_2 column density ratio in the Horsehead nebula increases from the UV-illuminated layers to the shielded cloud interior. Fossé et al. (2001) also explored the chemistry in TMC-1 and concluded that the cyclic-to-linear abundance ratio of C_3H_2 increases with decreasing electron abundances. Our reference model for the Orion Bar also predicts that both the $[c\text{-C}_3\text{H}_2]/[l\text{-H}_2\text{C}_3]$ and the $[c\text{-C}_3\text{H}]/[l\text{-C}_3\text{H}]$ ratios increase with A_V as the FUV-radiation field is attenuated and x_e decreases (see Fig. 19). This suggests that the formation of the linear isomers (less stable energetically) is favoured in the warm UV-illuminated gas with high ionisation fractions. The low $[c\text{-C}_3\text{H}]/[l\text{-C}_3\text{H}] \approx 3$ abundance ratio we infer towards the Orion Bar is the same as that found in the PDR around the protoplanetary nebula CRL 618 (Pardo & Cernicharo 2007) and slightly higher than that inferred towards the Horsehead PDR (~ 1.8) (Teyssier et al. 2004). Such low abundance ratios (≤ 3) therefore seem a signature of the presence of FUV radiation and high ionisation fractions. On the other hand, the $[c\text{-C}_3\text{H}_2]/[l\text{-H}_2\text{C}_3] \approx 34$ ratio we infer towards the Orion Bar is much higher than that observed in the Horsehead PDR (≈ 3.5) and in diffuse clouds. At this point, the reason for such a difference is not clear, but may suggest that in the Orion Bar, the $c\text{-C}_3\text{H}_2$ abundance is enhanced by formation routes not considered in our pure-gas phase models.

7.4. C_2H versus $c\text{-C}_3\text{H}_2$ in other environments

In order to investigate the role of UV radiation and gas density in the formation of the small hydrocarbons, we compare the column density of several hydrocarbons in different environments. The considered sources are the Monoceros R2 (Mon R2) ultra-compact H₂ region ($\chi > 10^5$ in Draine units and $\chi/n_{\text{H}} \approx 10^{-1} \text{ cm}^3$ dissociation parameter, e.g. Pilleri et al. 2013), the Orion Bar PDR ($\chi \approx 10^4$ and $\chi/n_{\text{H}} \approx 0.5 \text{ cm}^3$, e.g. Marconi et al. 1998), the nucleus of the starburst galaxy M82 ($\chi \approx 6 \times 10^3$ and $\chi/n_{\text{H}} \approx 0.06 \text{ cm}^3$, e.g. Fuente et al. 2008), the reflection nebula NGC 7023 ($\chi \approx 10^3$ and $\chi/n_{\text{H}} \approx 0.06 \text{ cm}^3$, e.g. Joblin et al. 2010), diffuse clouds ($\chi \approx 1$ and $\chi/n_{\text{H}} \approx 10^{-2} \text{ cm}^3$, e.g. Liszt et al. 2012), and the Horsehead PDR ($\chi \approx 60$ and $\chi/n_{\text{H}} \approx 6 \times 10^{-3} \text{ cm}^3$, e.g. Pety et al. 2012). We also considered three sources shielded from external UV-illumination: the cold and dense cloud TMC-1, the low-mass protostar (hot corino) IRAS 16293-2422, and the dense core L1498 (the three with a $\chi/n_{\text{H}} \ll 10^{-4} \text{ cm}^3$).

The variation of incident UV radiation flux affects the relative abundance of certain hydrocarbons. As expected for widespread interstellar molecules, intense C_2H and $c\text{-C}_3\text{H}_2$ emission is detected in all the above sources. However, the observed $[\text{C}_2\text{H}]/[c\text{-C}_3\text{H}_2]$ column density ratio varies from highly irradiated sources like the Orion Bar (~ 32) to UV-shielded sources (< 10) (see Fig. 21). In fact, the observed $[\text{C}_2\text{H}]/[c\text{-C}_3\text{H}_2]$ ratios seem to scale with χ/n_{H} , the critical parameter determining most of the PDR properties. In the Orion Bar model this can be readily seen in the predicted decrease of the $[\text{C}_2\text{H}]/[c\text{-C}_3\text{H}_2]$ abundance ratio with increasing A_V (Fig. 19). This trend can be explained by the effect of UV radiation on the chemical processes governing the hydrocarbon formation. In particular, the chemistry in cold shielded gas is driven by the ionisation of H_2 by cosmic rays, and the hydrocarbons are mainly produced by

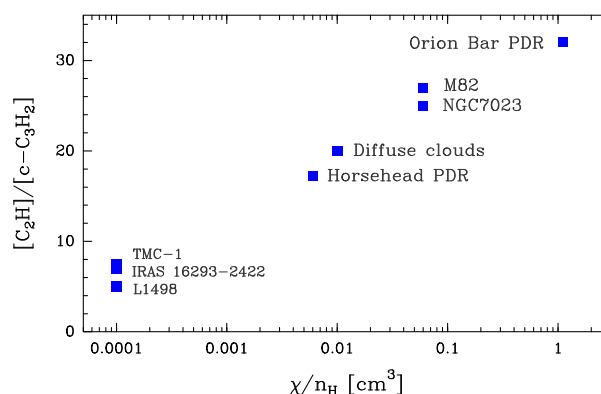


Fig. 21. Observed $[\text{C}_2\text{H}]/[c\text{-C}_3\text{H}_2]$ column density ratios as a function of χ/n_{H} dissociation parameter (see text) in the Orion Bar PDR, the nucleus of M82 (Aladro et al. 2011), NGC 7023 (NW PDR; Fuente et al. 1993, 2003), diffuse clouds (averaged abundances towards B0355, B0415, B2200, and B2251; Liszt et al. 2012), Horsehead PDR (Pety et al. 2012), TMC-1 (towards the cyanopolyne peak; Ohishi et al. 1992), IRAS 16293-2422 (van Dishoeck et al. 1995), and L1498 (Tafalla et al. 2006; Padovani et al. 2009).

ion-molecule barrierless reactions. Time-dependent effects and grain surface processes are also likely important deep inside clouds (Pilleri et al. 2013). In strongly UV irradiated environments, the presence of C^+ and H_2^+ triggers the rapid formation of hydrocarbons ions like CH^+ , CH_2^+ , and CH_3^+ (see Sect. 6.2). In the associated warm gas, neutral-neutral reactions (e.g. reactions of C_n or neutral hydrocarbons with H and H_2) that do not play a role in the cold gas become efficient (see e.g. Cernicharo 2004). They allow high abundances of hydrocarbon molecules to be maintained despite the large UV field. For the typical densities in PDRs ($\sim 10^5 \text{ cm}^{-3}$) our gas-phase models predict higher column densities of C_2H in strongly irradiated PDRs ($\chi > 1000$) than in low UV-flux PDRs. On the other hand, they predict decreasing column densities of $c\text{-C}_3\text{H}_2$ for $\chi > 1000$. Therefore, the $[\text{C}_2\text{H}]/[c\text{-C}_3\text{H}_2]$ ratio is expected to increase with the strength of the UV radiation field and observations seem to confirm this. For high UV-fluxes, photodissociation is the main destruction mechanism of C_2H and $c\text{-C}_3\text{H}_2$ up to a few A_V . The $c\text{-C}_3\text{H}_2$ photodissociation rate is a factor of ~ 4 higher than that of C_2H (e.g. van Dishoeck et al. 2006). For the Orion Bar physical conditions this contributes to the fact that C_2H is predicted to peak slightly closer to the dissociation front, and also to the general increase in $c\text{-C}_3\text{H}_2$ column density compared to C_2H when the UV field decreases.

The dense PDR around Mon R2 H₂ region (not shown in Fig. 21) displays the highest $[\text{C}_2\text{H}]/[c\text{-C}_3\text{H}_2] \sim 125$ ratio (Pilleri et al. 2013). This is a more extreme environment where the gas is heated to very high temperatures, favouring the production of simple hydrocarbons like CH^+ (Pilleri et al. 2014) or C_2H (Pilleri et al. 2013) through the hot-gas PDR chemistry described in Sect. 6.1.

Hydrocarbons are also detected in diffuse clouds (e.g. Liszt et al. 2012, 2014), where radiation fields ($\chi \approx 1$) and densities ($n_{\text{H}} \approx 100 \text{ cm}^{-3}$) are lower than in PDRs. However, owing to the similar χ/n_{H} dissociation parameter, diffuse clouds and low-FUV flux PDRs are expected to share common characteristics. The $[\text{C}_2\text{H}]/[c\text{-C}_3\text{H}_2]$ ratio inferred in diffuse clouds (~ 20) is more similar to the one inferred in the Horsehead PDR (~ 17), a low UV-flux and low χ/n_{H} PDR, and indeed is lower than the value observed in the Orion Bar (~ 32).

A&A 575, A82 (2015)

In contrast to the low and high illumination PDRs, dark clouds and hot corinos show the lowest $[C_2H]/[c-C_3H_2]$ ratios (<10). The exact ratios in these UV-shielded environments are probably very time-dependent, i.e. the molecular abundances depends on the evolutive stage of the clouds.

In a broader extragalactic context, the nucleus of M82, which is the most studied example of an extragalactic starburst, shares similar photochemical characteristics with high UV-flux galactic PDRs. The chemistry of its nucleus seems to be the result of an old starburst mainly affected by the influence of intense UV fields from massive stars, where star formation has almost exhausted the molecular gas reservoir (Fuente et al. 2008). In the study of the chemical complexity of the NE lobe of the M82 galaxy carried out by Aladro et al. (2011), they found that C_2H is the brightest spectral feature in the 1.3 mm and 2 mm bands. The $[C_2H]/[c-C_3H_2]$ ratio observed towards M82 (~ 27) lies in between that of the Orion Bar (~ 32) and of NGC 7023 (~ 18 – 32 ; see Fuente et al. 1993, 2003).

In summary, observations and models suggest that the $[C_2H]/[c-C_3H_2]$ ratio is a good tracer of increasing χ/n_H values. Ratios above ~ 10 suggest the presence of UV radiation ($\chi > 1$), with $[C_2H]/[c-C_3H_2]$ ratios above ~ 30 probing the presence of strong radiation fields ($\chi > 10^3$). In combination with the observation of low $[c-C_3H]/[l-C_3H]$ isomeric ratios (≤ 3), characteristic of high x_e environments, these ratios are good diagnostics of the presence of an active photochemistry. On the other hand, $[C_2H]/[c-C_3H_2] \lesssim 10$ and $[c-C_3H]/[l-C_3H] \gtrsim 10$ ratios are indicative of low x_e gas shielded from external UV radiation.

7.5. PAH/HAC photodestruction and grain surface chemistry

Another difference between low and high UV-illumination environments is the spatial distribution of the hydrocarbons emission. The C_2H and $c-C_3H_2$ emission spatially correlates very well in the Horsehead PDR (Pety et al. 2005), diffuse clouds (Lucas & Liszt 2000; Gerin et al. 2011), and in the Orion Bar PDR (Fig. 10). Furthermore, a tight correlation between the PAHs and the small hydrocarbon emission was found in the Horsehead PDR from high angular resolution interferometric observations (Pety et al. 2005). Following previous suggestions (Fossé et al. 2000; Fuente et al. 2003; Teyssier et al. 2004), Pety et al. (2005) proposed that the photo-fragmentation of PAHs likely increases the abundance of small hydrocarbons in the Horsehead. In the Orion Bar, the $8\mu m$ PAH emission and the C_2H and $c-C_3H_2$ emission clearly show a different spatial distribution (Fig. 10). Lacking higher angular resolution observations and a complete model of the PAH/VSG photoerosion (Pillari et al. 2012), we can only conclude that in strongly irradiated PDRs like the Orion Bar, photodestruction of PAHs is not a necessary condition to explain the observed abundances of the simplest hydrocarbons.

Nevertheless, additional top-down formation routes for hydrocarbon molecules not included in our gas-phase models may take place in PDRs. In particular, recent ultra-high vacuum experiments with carbonaceous grains show that hydrogen atoms attached to the grain surface can efficiently react and produce a large variety of organic molecules, from PAHs to acetylene (Merino et al. 2014). We note that C_2H_2 photodissociation produces C_2H and the reaction of C_2H_2 with C^+ forms the observed hydrocarbon ion $l-C_3H^+$, an important gas-phase precursor of C_3H_2 and C_3H . In addition, laboratory experiments performed by Alata et al. (2014) show that the photodestruction of hydrogenated amorphous carbon (HAC) grains, observed in the diffuse medium (Duley & Williams 1983), also leads to the production

of small hydrocarbons (such as CH_4) that can trigger the gas-phase formation of other hydrocarbons.

Since PAHs, carbonaceous grains, and H atoms are abundant in PDRs, both the photodestruction of PAHs/HACs and the chemistry that takes place at the surfaces of carbonaceous grains will need to be taken into account in future PDR models.

8. Summary and conclusions

We have investigated the spatial distribution and chemistry of small hydrocarbons in the strongly UV-irradiated Orion Bar PDR. We performed a complete millimetre line survey towards the Orion Bar dissociation front (the “CO⁺ peak”) covering a bandwidth of ~ 220 GHz using the IRAM 30 m telescope. These observations have been complemented with $\sim 2' \times 2'$ maps of the C_2H and $c-C_3H_2$ emission. Approximately 40% of the detected lines have been assigned to hydrocarbons (C_2H , C_4H , $c-C_3H_2$, $c-C_3H$, $C^{13}CH$, ^{13}CCH , $l-C_3H$, and $l-H_2C_3$ in decreasing order of abundance). We also present the detection of nine rotational lines of the newly discovered hydrocarbon ion $l-C_3H^+$, allowing us to improve its spectroscopic constants. No anions, lines from vibrationally excited states, or deuterated hydrocarbons were detected. A detailed analysis of the excitation conditions and chemistry was carried out. In particular, we obtained the following results:

- Although the Orion Bar is a harsh environment, the millimetre line survey shows a relatively rich molecular line spectra, with more than 200 lines arising from hydrocarbons.
- The inferred rotational temperatures range from 17 to 77 K (most species have $T_{rot} < 30$ K) and column densities ranging from 10^{11} to 10^{14} cm⁻². C_2H is the most abundant of the detected hydrocarbons ($\sim 10^{-8}$ with respect to H nuclei).
- We obtain similar rotational temperatures for ortho and para forms of cyclic and linear C_3H_2 . The inferred $c-C_3H_2$ ortho-to-para ratio is 2.8 ± 0.6 , consistent with the high temperature limit.
- The $[C^{13}CH]/[^{13}CCH]$ ratio is 1.4 ± 0.1 and shows that fractionation processes differently affect the two ^{13}C isotopes of C_2H . We suggest that reactions of C_2H with $^{13}C^+$, as well as reactions of C_2H isotopologues with H atoms, can explain the observed levels of $C^{13}CH$ fractionation in the Orion Bar.
- We constrain the beam-averaged physical conditions from non-LTE models of C_2H and $c-C_3H_2$. The best fits for C_2H are obtained for $T_k \gtrsim 150$ K and $n(H_2) \gtrsim 10^5$ cm⁻³. Slightly denser gas and lower temperatures are required to fit the $c-C_3H_2$ lines.
- We provide accurate upper limit abundances for chemically related carbon bearing molecules that are not detected in the PDR: $[C_2D]/[C_2H] < 0.2\%$, $[C_2H^-]/[C_2H] < 0.007\%$, and $[C_4H^-]/[C_4H] < 0.05\%$.
- Hydrocarbon molecules show moderate abundances towards the FUV-illuminated edge of the cloud, but they are also abundant in the more shielded cloud interior. The observed decrease of the $[C_2H]/[c-C_3H_2]$ column density ratio from the dissociation front to the molecular peak and observations towards different environments suggest that the $[C_2H]/[c-C_3H_2]$ abundance ratio increases with increasing χ/n_H values. In addition, the observation of low $[c-C_3H]/[l-C_3H]$ ratios (≤ 3) in the Orion Bar PDR probes a high electron abundance environment.
- We compare the inferred column densities with updated photochemical models. Our models can reasonably match the observed column densities of most hydrocarbons (within

S. Cuadrado et al.: The chemistry and spatial distribution of small hydrocarbons in UV-irradiated molecular clouds

factors of <3). The largest discrepancy is for C_4H : our model underestimates the C_4H column density by a factor of ~ 3 . Since the observed spatial distribution of the C_2H and $c\text{-}C_3H_2$ emission is similar but does not follow the PAH emission, we conclude that the photodestruction of PAHs is not a necessary requirement in high UV-flux PDRs to explain the observed abundances of the smallest hydrocarbons. Instead, endothermic reactions (or with barriers) between C^+ , radicals, and H_2 can dominate their formation. Still, photoerosion of PAHs/HACs/VSGs and surface chemistry on carbonaceous grains may be needed to explain the abundances of more complex hydrocarbons.

- The electron abundance influences the hydrocarbon chemistry beyond the cloud layers directly exposed to the UV radiation field. Unfortunately, the ionisation fraction depends on the poorly known abundances of low ionisation metals, on the density profile, and on the controversial presence of negatively charged PAH, grains, or polyatomic anions in cloud interiors. Improving our knowledge of these aspects, and on the products and details of PAH/HAC/VSG photoerosion and grain surface chemistry processes, will help us to improve our knowledge of the interstellar carbon chemistry.

Acknowledgements. This work has been partially funded by MINECO grants (CSD2009-00038, AYA2009-07304, and AYA2012-32032). The authors acknowledge the valuable comments and suggestions of the anonymous referee. We are grateful to the IRAM staff for their help during the observations. We warmly thank G. B. Esplugues and M. Agúndez for helping us with some of the observations presented in this work and for useful discussions. S.C. acknowledges support from FPI-INTA grant. P.P. acknowledges financial support from the Centre National d'Études Spatiales (CNES).

References

- Agúndez, M., Cernicharo, J., & Goicoechea, J. R. 2008a, *A&A*, **483**, 831
 Agúndez, M., Cernicharo, J., Güélin, M., et al. 2008b, *A&A*, **478**, L19
 Agúndez, M., Goicoechea, J. R., Cernicharo, J., Faure, A., & Roueff, E. 2010, *ApJ*, **713**, 662
 Aladro, R., Martín, S., Martín-Pintado, J., et al. 2011, *A&A*, **535**, A84
 Alata, I., Cruz-Díaz, G. A., Muñoz Caro, G. M., & Dartois, E. 2014, *A&A*, **569**, A119
 Allers, K. N., Jaffe, D. T., Lacy, J. H., Draine, B. T., & Richter, M. J. 2005, *ApJ*, **630**, 368
 Andree-Labsch, S., Ossenkopf, V., & Röllig, M. 2014, *A&A*, submitted [arXiv:1405.5553]
 Arab, H., Abergel, A., Habart, E., et al. 2012, *A&A*, **541**, A19
 Batrla, W., & Wilson, T. L. 2003, *A&A*, **408**, 231
 Baulch, D. L. 2005, *J. Phys. Chem. Ref. Data*, **34**, 757
 Bell, M. B., Sears, T. J., & Matthews, H. E. 1982, *ApJ*, **255**, L75
 Bell, M. B., Matthews, H. E., & Sears, T. J. 1983, *A&A*, **127**, 241
 Bernard-Salas, J., Habart, E., Arab, H., et al. 2012, *A&A*, **538**, A37
 Berné, O., Fuente, A., Goicoechea, J. R., et al. 2009, *ApJ*, **706**, L160
 Black, J. H., & van Dishoeck, E. F. 1987, *ApJ*, **322**, 412
 Botschwina, P., Stein, C., Sebald, P., Schröder, B., & Oswald, R. 2014, *ApJ*, **787**, 72
 Brünken, S., Kluge, L., Stoffels, A., Asvany, O., & Schlemmer, S. 2014, *ApJ*, **783**, L4
 Burton, M. G., Hollenbach, D. J., & Tielens, A. G. G. M. 1990, *ApJ*, **365**, 620
 Castor, J. I. 1970, *MNRAS*, **149**, 111
 Cernicharo, J. 2004, *ApJ*, **608**, L41
 Cernicharo, J. 2012, *EAS Pub. Ser.*, **58**, 251
 Cernicharo, J., & Güélin, M. 1996, *A&A*, **309**, L27
 Cernicharo, J., Güélin, M., & Askne, J. 1984, *A&A*, **138**, 371
 Cernicharo, J., Güélin, M., Menten, K. M., & Walmsley, C. M. 1987, *A&A*, **181**, L1
 Cernicharo, J., Gottlieb, C. A., Güélin, M., et al. 1991a, *ApJ*, **368**, L39
 Cernicharo, J., Gottlieb, C. A., Güélin, M., et al. 1991b, *ApJ*, **368**, L43
 Cernicharo, J., Cox, P., Fossé, D., & Güsten, R. 1999, *A&A*, **351**, 341
 Cernicharo, J., Güélin, M., & Kahane, C. 2000, *A&AS*, **142**, 181
 Chabot, M., Béroff, K., Gratier, P., Jallat, A., & Wakelam, V. 2013, *ApJ*, **771**, 90
 Chandra, S., & Kegel, W. H. 2000, *A&AS*, **142**, 113
 Combes, F., Boulanger, F., Encrenaz, P. J., et al. 1985, *A&A*, **147**, L25
 Coutens, A., Vastel, C., Caux, E., et al. 2012, *A&A*, **539**, A132
 De Beck, E., Lombaert, R., Agúndez, M., et al. 2012, *A&A*, **539**, A108
 DeFrees, D. J., & McLean, A. D. 1986, *ApJ*, **308**, L31
 Duley, W. W., & Williams, D. A. 1983, *MNRAS*, **205**, 67
 Dykstra, C. E., Parsons, C. A., & Oates, C. L. 1979, *J. Am. Chem. Soc.*, **101**, 1962
 Fortenberry, R. C., Huang, X., Crawford, T. D., & Lee, T. J. 2013, *ApJ*, **772**, 39
 Fossé, D., Cesarsky, D., Gerin, M., Lequeux, J., & Tiné, S. 2000, in ISO Beyond the Peaks: The 2nd ISO Workshop on Analytical Spectroscopy, eds. A. Salama, M. F. Kessler, K. Leech, & B. Schulz, *ESA SP*, **456**, 91
 Fossé, D., Cernicharo, J., Gerin, M., & Cox, P. 2001, *ApJ*, **552**, 168
 Fuente, A., Martín-Pintado, J., Cernicharo, J., & Bachiller, R. 1993, *A&A*, **276**, 473
 Fuente, A., Rodríguez-Franco, A., & Martín-Pintado, J. 1996, *A&A*, **312**, 599
 Fuente, A., Rodríguez-Franco, A., García-Burillo, S., Martín-Pintado, J., & Black, J. H. 2003, *A&A*, **406**, 899
 Fuente, A., García-Burillo, S., Gerin, M., et al. 2005, *ApJ*, **619**, L155
 Fuente, A., García-Burillo, S., Usero, A., et al. 2008, *A&A*, **492**, 675
 Furuya, K., Aikawa, Y., Sakai, N., & Yamamoto, S. 2011, *ApJ*, **731**, 38
 Gerin, M., Kaźmierczak, M., Jastrzebska, M., et al. 2011, *A&A*, **525**, A116
 Goicoechea, J. R., & Le Bourlot, J. 2007, *A&A*, **467**, 1
 Goicoechea, J. R., Rodríguez-Fernández, N. J., & Cernicharo, J. 2004, *ApJ*, **600**, 214
 Goicoechea, J. R., Pety, J., Gerin, M., et al. 2006, *A&A*, **456**, 565
 Goicoechea, J. R., Pety, J., Gerin, M., Hily-Blant, P., & Le Bourlot, J. 2009, *A&A*, **498**, 771
 Goicoechea, J. R., Joblin, C., Contursi, A., et al. 2011, *A&A*, **530**, L16
 Goldsmith, P. F., & Langer, W. D. 1999, *ApJ*, **517**, 209
 Gottlieb, C. A., Gottlieb, E. W., & Thaddeus, P. 1983a, *ApJ*, **264**, 740
 Gottlieb, C. A., Gottlieb, E. W., Thaddeus, P., & Kawamura, H. 1983b, *ApJ*, **275**, 916
 Gottlieb, C. A., Vrtilek, J. M., Gottlieb, E. W., Thaddeus, P., & Hjalmarsen, A. 1985, *ApJ*, **294**, L55
 Gottlieb, C. A., Gottlieb, E. W., Thaddeus, P., & Vrtilek, J. M. 1986, *ApJ*, **303**, 446
 Güélin, M., Green, S., & Thaddeus, P. 1978, *ApJ*, **224**, L27
 Güélin, M., Friberg, P., & Mezaoui, A. 1982, *A&A*, **109**, 23
 Güélin, M., Cernicharo, J., Kahane, C., Gomez-Gonzalez, J., & Walmsley, C. M. 1987, *A&A*, **175**, L5
 Güélin, M., Cernicharo, J., Travers, M. J., et al. 1997, *A&A*, **317**, L1
 Gupta, H., Rimmer, P., Pearson, J. C., et al. 2010, *A&A*, **521**, L47
 Habart, E., Dartois, E., Abergel, A., et al. 2010, *A&A*, **518**, L116
 Hogerheijde, M. R., Jansen, D. J., & van Dishoeck, E. F. 1995, *A&A*, **294**, 792
 Hollenbach, D., Kaufman, M. J., Bergin, E. A., & Melnick, G. J. 2009, *ApJ*, **690**, 1497
 Jansen, D. J., Spaans, M., Hogerheijde, M. R., & van Dishoeck, E. F. 1995, *A&A*, **303**, 541
 Joblin, C., Pilleri, P., Montillaud, J., et al. 2010, *A&A*, **521**, L25
 Kanata, H., Yamamoto, S., & Saito, S. 1987, *Chem. Phys. Lett.*, **140**, 221
 Langer, W. D., Graedel, T. E., Frerking, M. A., & Armentrout, P. B. 1984, *ApJ*, **277**, 581
 Langer, W. D., Velusamy, T., Kuiper, T. B. H., et al. 1997, *ApJ*, **480**, L63
 Le Bourlot, J., Pineau Des Forets, G., Roueff, E., & Flower, D. R. 1993, *A&A*, **267**, 233
 Le Bourlot, J., Le Petit, F., Pinto, C., Roueff, E., & Roy, F. 2012, *A&A*, **541**, A76
 Le Petit, F., Nehmé, C., Le Bourlot, J., & Roueff, E. 2006, *ApJS*, **164**, 506
 Lepp, S., & Dalgarno, A. 1988, *ApJ*, **324**, 553
 Lis, D. C., & Schilke, P. 2003, *ApJ*, **597**, L145
 Liszt, H., Sonnentrucker, P., Cordiner, M., & Gerin, M. 2012, *ApJ*, **753**, L28
 Liszt, H. S., Pety, J., Gerin, M., & Lucas, R. 2014, *A&A*, **564**, A64
 Lovas, F. J., Suenram, R. D., Ogata, T., & Yamamoto, S. 1992, *ApJ*, **399**, 325
 Lucas, R., & Liszt, H. S. 2000, *A&A*, **358**, 1069
 Maluendes, S. A., McLean, A. D., Yamashita, K., & Herbst, E. 1993, *J. Chem. Phys.*, **99**, 2812
 Mangum, J. G. 1993, *PASP*, **105**, 117
 Marcelino, N., Cernicharo, J., Agúndez, M., et al. 2007, *ApJ*, **665**, L127
 Marconi, A., Testi, L., Natta, A., & Walmsley, C. M. 1998, *A&A*, **330**, 696
 Martín, S., Mauersberger, R., Martín-Pintado, J., Henkel, C., & García-Burillo, S. 2006, *ApJS*, **164**, 450
 Mazzotti, F. J., Raghunandan, R., Esmail, A. M., Tulej, M., & Maier, J. P. 2011, *J. Chem. Phys.*, **134**, 164303
 McCarthy, M., Gottlieb, C., & Thaddeus, P. 1995, *J. Mol. Spectr.*, **173**, 303
 McEwan, M. J., Scott, G. B. I., Adams, N. G., et al. 1999, *ApJ*, **513**, 287
 McGuire, B. A., Carroll, P. B., Loomis, R. A., et al. 2013, *ApJ*, **774**, 56
 McGuire, B. A., Carroll, P. B., Sanders, J. L., et al. 2014, *MNRAS*, **442**, 2901
 Meier, D. S., & Turner, J. L. 2005, *ApJ*, **618**, 259
 Meier, D. S., & Turner, J. L. 2012, *ApJ*, **755**, 104
 Melnick, G. J., Tolls, V., Goldsmith, P. F., et al. 2012, *ApJ*, **752**, 26

A&A 575, A82 (2015)

- Menten, K. M., Reid, M. J., Forbrich, J., & Brunthaler, A. 2007, *A&A*, **474**, 515
- Merino, P., Švec, M., Martínez, J. I., et al. 2014, *Nat. Comm.*, **5**
- Müller, H. S. P., Klaus, T., & Winnewisser, G. 2000, *A&A*, **357**, L65
- Müller, H. S. P., Thorwirth, S., Roth, D. A., & Winnewisser, G. 2001, *A&A*, **370**, L49
- Müller, H. S. P., Schlöder, F., Stutzki, J., & Winnewisser, G. 2005, *J. Mol. Struct.*, **742**, 215
- Müller, H. S. P., Goicoechea, J. R., Cernicharo, J., et al. 2014, *A&A*, **569**, L5
- Nagy, Z., Van der Tak, F. F. S., Ossenkopf, V., et al. 2013, *A&A*, **550**, A96
- Neufeld, D. A., Gusdorf, A., Güsten, R., et al. 2014, *ApJ*, **781**, 102
- Ohishi, M., Irvine, W. M., & Kaifu, N. 1992, in *Astrochemistry of Cosmic Phenomena*, ed. P. D. Singh, *IAU Symp.*, **150**, 171
- Ossenkopf, V., Röllig, M., Neufeld, D. A., et al. 2013, *A&A*, **550**, A57
- Padovani, M., Walmsley, C. M., Tafalla, M., Galli, D., & Müller, H. S. P. 2009, *A&A*, **505**, 1199
- Pardo, J. R., & Cernicharo, J. 2007, *ApJ*, **654**, 978
- Pardo, J. R., Encrenaz, P. J., & Breton, D. 2001, in *Preserving the Astronomical Sky*, eds. R. J. Cohen, & W. T. Sullivan, *IAU Symp.*, **196**, 255
- Pardo, J. R., Cernicharo, J., Goicoechea, J. R., Guélin, M., & Asensio Ramos, A. 2007, *ApJ*, **661**, 250
- Parmar, P. S., Lacy, J. H., & Achtermann, J. M. 1991, *ApJ*, **372**, L25
- Pety, J., Teyssier, D., Fossé, D., et al. 2005, *A&A*, **435**, 885
- Pety, J., Gratier, P., Guzmán, V., et al. 2012, *A&A*, **548**, A68
- Pickett, H. M., Poynter, R. L., Cohen, E. A., et al. 1998, *J. Quant. Spectr. Rad. Transf.*, **60**, 883
- Pilleri, P., Montillaud, J., Berné, O., & Joblin, C. 2012, *A&A*, **542**, A69
- Pilleri, P., Treviño-Morales, S., Fuente, A., et al. 2013, *A&A*, **554**, A87
- Pilleri, P., Fuente, A., Gerin, M., et al. 2014, *A&A*, **561**, A69
- Pitts, W. M., Pasternack, L., & McDonald, J. R. 1982, *Chem. Phys.*, **68**, 417
- Sakai, N., Saruwatari, O., Sakai, T., Takano, S., & Yamamoto, S. 2010, *A&A*, **512**, A31
- Saleck, A. H., Eigler, K., Simon, R., Vowinkel, B., & Winnewisser, G. 1992, in *Astronomische Gesellschaft Abstract Series 7*, ed. G. Klare, 83
- Saleck, A. H., Simon, R., Winnewisser, G., & Wouterloot, J. G. A. 1994, *Canad. J. Phys.*, **72**, 747
- Senent, M. L., & Hochlaf, M. 2010, *ApJ*, **708**, 1452
- Sheehan, S. M., Parsons, B. F., Zhou, J., et al. 2008, *J. Chem. Phys.*, **128**, 034301
- Simon, R., Stutzki, J., Sternberg, A., & Winnewisser, G. 1997, *A&A*, **327**, L9
- Sobolev, V. V. 1960, *Moving envelopes of stars* (Cambridge: Harvard University Press)
- Spielfiedel, A., Feautrier, N., Najjar, F., et al. 2012, *MNRAS*, **421**, 1891
- Stoerzer, H., Stutzki, J., & Sternberg, A. 1995, *A&A*, **296**, L9
- Tafalla, M., Santiago-García, J., Myers, P. C., et al. 2006, *A&A*, **455**, 577
- Tarroni, R., & Carter, S. 2003, *J. Chem. Phys.*, **119**, 12878
- Tercero, B., Cernicharo, J., Pardo, J. R., & Goicoechea, J. R. 2010, *A&A*, **517**, A96
- Teyssier, D., Fossé, D., Gerin, M., et al. 2004, *A&A*, **417**, 135
- Teyssier, D., Hily-Blant, P., Gerin, M., et al. 2005, in *ESA SP 577*, ed. A. Wilson, 423
- Thaddeus, P., Gottlieb, C. A., Hjalmarson, A., et al. 1985a, *ApJ*, **294**, L49
- Thaddeus, P., Vrtilek, J. M., & Gottlieb, C. A. 1985b, *ApJ*, **299**, L63
- Tielens, A. G. G. M., & Hollenbach, D. 1985, *ApJ*, **291**, 722
- Tielens, A. G. G. M., Meixner, M. M., van der Werf, P. P., et al. 1993, *Science*, **262**, 86
- Tucker, K. D., Kutner, M. L., & Thaddeus, P. 1974, *ApJ*, **193**, L115
- Turner, B. E., Herbst, E., & Terzieva, R. 2000, *ApJS*, **126**, 427
- van der Tak, F. F. S., Black, J. H., Schöier, F. L., Jansen, D. J., & van Dishoeck, E. F. 2007, *A&A*, **468**, 627
- van der Tak, F. F. S., Nagy, Z., Ossenkopf, V., et al. 2013, *A&A*, **560**, A95
- van der Werf, P. P., Stutzki, J., Sternberg, A., & Krabbe, A. 1996, *A&A*, **313**, 633
- van der Werf, P. P., Goss, W. M., & O'Dell, C. R. 2013, *ApJ*, **762**, 101
- van der Wiel, M. H. D., van der Tak, F. F. S., Ossenkopf, V., et al. 2009, *A&A*, **498**, 161
- van Dishoeck, E. F., & Black, J. H. 1988, *ApJ*, **334**, 771
- van Dishoeck, E. F., Blake, G. A., Jansen, D. J., & Groesbeck, T. D. 1995, *ApJ*, **447**, 760
- van Dishoeck, E. F., Jonkheid, B., & van Hemert, M. C. 2006, *Faraday Discussions*, **133**, 231
- Vrtilek, J. M., Gottlieb, C. A., Langer, W. D., Thaddeus, P., & Wilson, R. W. 1985, *ApJ*, **296**, L35
- Vrtilek, J. M., Gottlieb, C. A., & Thaddeus, P. 1987, *ApJ*, **314**, 716
- Vrtilek, J. M., Gottlieb, A., Gottlieb, E. W., Killian, T. C., & Thaddeus, P. 1990, *ApJ*, **364**, L53
- Walmsley, C. M., Natta, A., Oliva, E., & Testi, L. 2000, *A&A*, **364**, 301
- Wilson, T. L., & Rood, R. 1994, *ARA&A*, **32**, 191
- Woon, D. E. 1995, *Chem. Phys. Lett.*, **244**, 45
- Wootten, A., Bozayan, E. P., Garrett, D. B., Loren, R. B., & Snell, R. L. 1980, *ApJ*, **239**, 844
- Yamamoto, S., & Saito, S. 1994, *J. Chem. Phys.*, **101**, 5484
- Yamamoto, S., Saito, S., Guelin, M., et al. 1987a, *ApJ*, **323**, L149
- Yamamoto, S., Saito, S., Ohishi, M., et al. 1987b, *ApJ*, **322**, L55
- Young Owl, R. C., Meixner, M. M., Wolfire, M., Tielens, A. G. G. M., & Tauber, J. 2000, *ApJ*, **540**, 886

Appendix A: MADEX: a local, non-LTE LVG code

The physical conditions in ISM clouds are such that molecular excitation is usually far from LTE. MADEX solves the non-LTE level excitation and line radiative transfer in a 1D isothermal homogeneous medium assuming a large velocity gradient (LVG) and spherical geometry. In this approximation the statistical-equilibrium equations are solved assuming *local* excitation conditions and a geometrically averaged escape probability formalism for the emitted photons (see details in Sobolev 1960; Castor 1970). This description allows one to take into account radiative trapping and collisional excitation and deexcitation more easily and computationally faster than more sophisticated *non-local* codes in which the radiative coupling between different cloud positions is explicitly treated (Montecarlo simulations, ALI methods, etc.). As a small benchmark, and in order to place the conclusions of our work on a firm ground, here we compare MADEX results with those obtained with RADEX⁶, a publicly available escape probability code (see van der Tak et al. 2007 for the basic formulae).

We ran several models for CO (a low-dipole moment molecule with $\mu = 0.12$ D) and for HCO⁺ ($\mu = 3.90$ D). These are typical examples of molecules with low and high critical densities, respectively (e.g. $n_{\text{cr}}(\text{CO } 2 \rightarrow 1)$ of a few 10^4 cm^{-3} and $n_{\text{cr}}(\text{HCO}^+ 2 \rightarrow 1)$ of a few 10^6 cm^{-3}). We note that for optically thin emission lines and for densities $n(\text{H}_2) \gg n_{\text{cr}}$, collisions dominate over radiative excitations and level populations get closer to LTE ($T_{\text{ex}} \rightarrow T_{\text{k}}$) as the density increases. For optically thick lines, line trapping effectively reduces n_{cr} and lines can be thermalized at lower densities. In the low density limit ($n(\text{H}_2) \ll n_{\text{cr}}$), level populations are subthermally excited and, as the density decreases, tend to thermalize to the background radiation temperature ($T_{\text{k}} > T_{\text{ex}} \rightarrow 2.7$ K in the millimetre domain).

Figure A.1 (upper panels) shows low density model results ($n(\text{H}_2) = 3 \times 10^3 \text{ cm}^{-3}$) for $N(\text{CO})$ from 10^{15} to 10^{18} cm^{-2} at two different gas temperatures ($T_{\text{k}} = 10$ and 150 K, blue and red points, respectively). The left and right figures show the computed excitation temperatures and line centre opacities, respectively, for the CO $2 \rightarrow 1$, $3 \rightarrow 2$, and $4 \rightarrow 3$ transitions. Figure A.1 (lower panels) shows higher density models ($n(\text{H}_2) = 3 \times 10^5 \text{ cm}^{-3}$) close to thermalization ($T_{\text{ex}} \approx T_{\text{k}}$). We note that the selected range of column densities represents a transition from optically thin to optically thick emission. A line width of 1 km s^{-1} is adopted in all models.

Figure A.2 shows the same kind of models for HCO⁺ (column densities from 10^{12} to 10^{15} cm^{-2}). Owing to the much higher critical densities of HCO⁺ rotational transitions, their excitation is sub-thermal ($T_{\text{ex}} < T_{\text{k}}$) in most of the explored parameter space. In addition, their associated emission lines become optically thick for column densities smaller than those of CO.

The filled and empty square marks in Figs. A.1 and A.2 represent computations performed with MADEX and RADEX

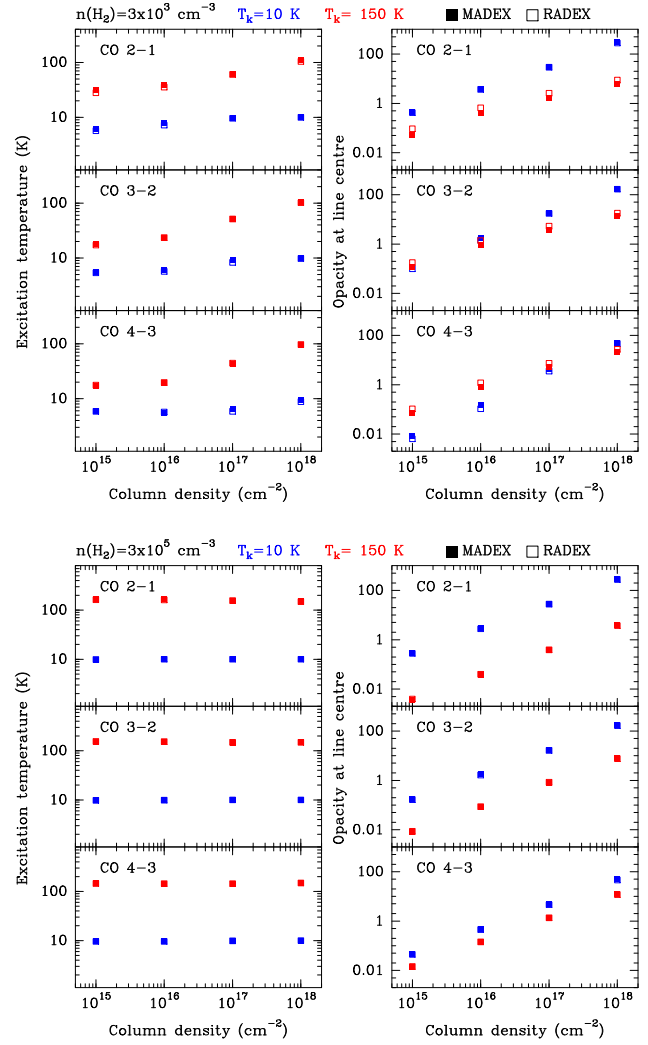
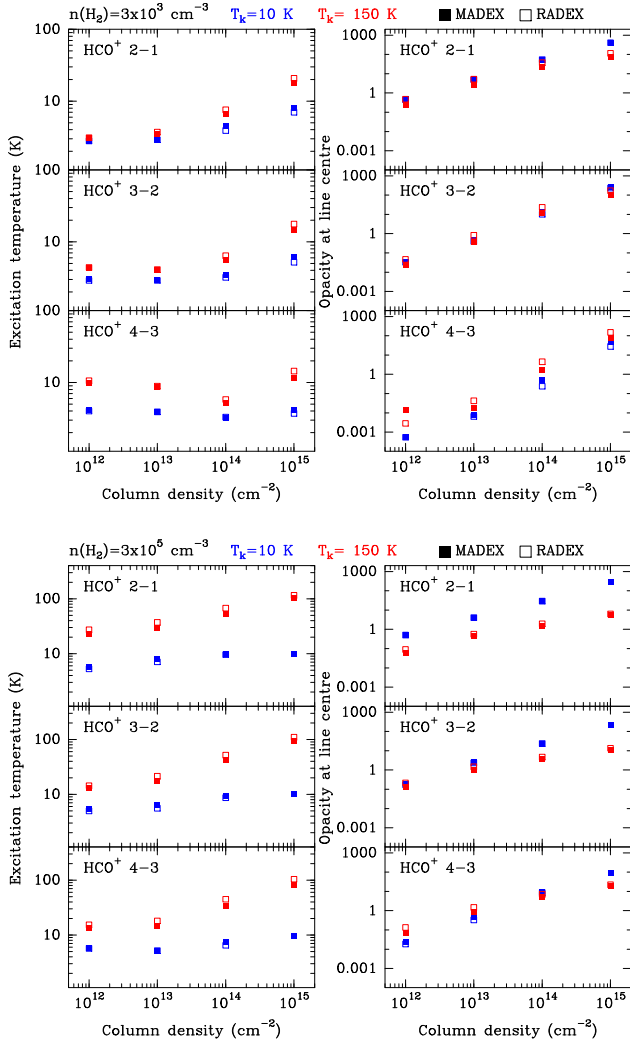


Fig. A.1. CO isothermal models carried out with MADEX (filled squares) and RADEX (empty squares) non-LTE radiative transfer codes. Two gas densities are considered: $n(\text{H}_2) = 3 \times 10^3 \text{ cm}^{-3}$ (upper panels) and $n(\text{H}_2) = 3 \times 10^5 \text{ cm}^{-3}$ (lower panels). Excitation temperatures and line centre opacities (left and right panels, respectively) are shown for several rotational transitions in the millimetre domain as a function of CO column density. Two gas temperatures are considered, 10 K (blue points) and 150 K (red points).

codes, respectively. We checked that for the considered models, the predicted excitation temperatures and line opacities agree within $\sim 20\%$ and $\sim 40\%$, respectively. This translates into maximum brightness temperature differences of $\sim 50\%$ in the most extreme cases.

⁶ <http://www.sron.rug.nl/~vdtak/radex/radex.php>

A&A 575, A82 (2015)

Fig. A.2. Same as Fig. A.1 but for HCO^+ .

S. Cuadrado et al.: The chemistry and spatial distribution of small hydrocarbons in UV-irradiated molecular clouds

Appendix B: Identified hydrocarbon lines**Table B.1.** Line parameters of C₂H.

Transition	Frequency	E_u	A_{ul}	S_{ij}	g_u	$\int T_{MB} dv$	v_{LSR}	Δv	T_{MB}
$(N, J, F)_u \rightarrow (N, J, F)_l$	[MHz]	[K]	[s ⁻¹]			[K km s ⁻¹]	[km s ⁻¹]	[km s ⁻¹]	[K]
(1, 3/2, 1) \rightarrow (0, 1/2, 1)	87 284.105 ^F	4.2	2.59×10^{-7}	0.2	3	0.40(1)	10.52(2)	3.03(6)	0.12
(1, 3/2, 2) \rightarrow (0, 1/2, 1)	87 316.898 ^F	4.2	1.53×10^{-6}	1.7	5	3.82(1)	10.47(1)	2.91(1)	1.23
(1, 3/2, 1) \rightarrow (0, 1/2, 0)	87 328.585 ^F	4.2	1.27×10^{-6}	0.8	3	1.86(1)	10.47(1)	2.89(2)	0.61
(1, 1/2, 1) \rightarrow (0, 1/2, 1)	87 401.989 ^F	4.2	1.27×10^{-6}	0.8	3	1.89(1)	10.48(1)	2.88(1)	0.61
(1, 1/2, 0) \rightarrow (0, 1/2, 1)	87 407.165 ^F	4.2	1.53×10^{-6}	0.3	1	0.74(1)	10.49(1)	2.84(4)	0.25
(1, 1/2, 1) \rightarrow (0, 1/2, 0)	87 446.470 ^F	4.2	2.61×10^{-7}	0.2	3	0.39(1)	10.49(2)	2.90(5)	0.13
(2, 5/2, 2) \rightarrow (1, 3/2, 2)	174 634.861 ^W	12.6	1.00×10^{-6}	0.1	5	1.32(19)	—	—	—
(2, 5/2, 3) \rightarrow (1, 3/2, 2)	174 663.199 ^W	12.6	1.47×10^{-5}	2.8	7	13.90(21)	—	—	—
(2, 5/2, 2) \rightarrow (1, 3/2, 1)	174 667.629 ^W	12.6	1.36×10^{-5}	1.9	5		—	—	—
(2, 3/2, 2) \rightarrow (1, 1/2, 1)	174 721.744 ^W	12.6	1.16×10^{-5}	1.6	5	2.84(17)	—	—	—
(2, 3/2, 1) \rightarrow (1, 1/2, 0)	174 728.071 ^W	12.6	8.16×10^{-6}	0.7	3	4.06(53)	—	—	—
(2, 3/2, 1) \rightarrow (1, 1/2, 1)	174 733.210 ^W	12.6	5.08×10^{-6}	0.4	3		—	—	—
(2, 3/2, 2) \rightarrow (1, 3/2, 2)	174 806.843 ^W	12.6	2.67×10^{-6}	0.4	5	1.52(26)	—	—	—
(3, 7/2, 3) \rightarrow (2, 5/2, 3)	261 978.120 ^F	25.1	1.95×10^{-6}	0.1	7	0.33(1)	10.67(4)	2.04(9)	0.15
(3, 7/2, 4) \rightarrow (2, 5/2, 3)	262 004.260 ^F	25.2	5.31×10^{-5}	3.9	9	9.19(5)	10.72(1)	1.86(1)	4.65
(3, 7/2, 3) \rightarrow (2, 5/2, 2)	262 006.482 ^F	25.1	5.10×10^{-5}	2.9	7	10.10(6)	10.72(1)	2.39(1)	3.97
(3, 5/2, 3) \rightarrow (2, 3/2, 2)	262 064.986 ^F	25.2	4.88×10^{-5}	2.8	7	6.74(7)	10.78(1)	1.90(2)	3.33
(3, 5/2, 2) \rightarrow (2, 3/2, 1)	262 067.469 ^F	25.2	4.46×10^{-5}	1.8	5	6.18(7)	10.83(1)	2.39(3)	2.43
(3, 5/2, 2) \rightarrow (2, 3/2, 2)	262 078.934 ^F	25.2	5.99×10^{-6}	0.2	5	0.68(2)	10.75(3)	2.09(8)	0.30
(3, 5/2, 3) \rightarrow (2, 5/2, 3)	262 208.614 ^F	25.2	3.95×10^{-6}	0.2	7	0.67(1)	10.77(2)	2.29(6)	0.27
(3, 5/2, 3) \rightarrow (2, 5/2, 2)	262 236.957 ^F	25.2	4.03×10^{-7}	0.02	7	0.06(1)	10.71(9)	1.35(22)	0.04
(3, 5/2, 2) \rightarrow (2, 5/2, 2)	262 250.928 ^F	25.2	2.27×10^{-6}	0.09	5	0.27(1)	10.67(5)	2.17(15)	0.12
(4, 9/2, 4) \rightarrow (3, 7/2, 4)	349 312.833 ^F	41.9	2.98×10^{-6}	0.09	9	0.22(1)	10.72(22)	2.32(44)	0.15*
(4, 9/2, 5) \rightarrow (3, 7/2, 4)	349 337.707 ^F	41.9	1.30×10^{-4}	4.9	11	18.09(5)	10.64(1)	2.93(1)	4.65
(4, 9/2, 4) \rightarrow (3, 7/2, 3)	349 338.989 ^F	41.9	1.27×10^{-4}	3.9	9		—	—	—
(4, 7/2, 4) \rightarrow (3, 5/2, 3)	349 399.274 ^F	41.9	1.25×10^{-4}	3.8	9	14.02(7)	10.69(1)	3.01(1)	3.33
(4, 7/2, 3) \rightarrow (3, 5/2, 2)	349 400.669 ^F	41.9	1.19×10^{-4}	2.9	7		—	—	—
(4, 7/2, 3) \rightarrow (3, 5/2, 3)	349 414.640 ^F	41.9	7.02×10^{-6}	0.2	7	0.29(2)	10.80(11)	1.89(28)	0.30*
(4, 7/2, 4) \rightarrow (3, 7/2, 4)	349 603.611 ^F	41.9	5.18×10^{-6}	0.2	9	0.34(1)	10.61(12)	2.14(26)	0.27

Notes. General notes to Appendix B tables: (i) Frequency, energy of the upper level of each transition (E_u), Einstein coefficient for spontaneous emission (A_{ul}), intrinsic line strength (S_{ij}), and the level degeneracy (g_u) from MADEX. The velocity-integrated intensity ($\int T_{MB} dv$), radial velocity (v_{LSR}), and FWHM line width (Δv) obtained by Gaussian fit. (ii) Parentheses indicate the uncertainty obtained by the Gaussian fitting programme. The fit uncertainty in units of the last significant digit is given in Tables B.1, B.6, and B.8. (iii) The weighted average of hyperfine and fine components is used for the analysis of C₂H, *i*-C₃H, *c*-C₃H, and C₄H molecules. (iv) Fully overlapping transitions are marked with connecting symbols. (v) We note that the line intensities in Tables B.2, B.4, B.5, and B.7 are given in units of mK. (vi) Labels: ^(F) Detected with FFTS backend. ^(W) The lines detected with WILMA backend just give information about the integrated line intensity (see Sect. 2). (*) Marginal detection.

A&A 575, A82 (2015)

Table B.2. Line parameters of ^{13}CCH and C^{13}CH .

Transition	Frequency	E_u	A_{ul}	S_{ij}	g_u	$\int T_{\text{MB}} dv$	v_{LSR}	Δv	T_{MB}
$(N, J, F_1, F)_u \rightarrow (N, J, F_1, F)_l$	[MHz]	[K]	[s $^{-1}$]			[mK km s $^{-1}$]	[km s $^{-1}$]	[km s $^{-1}$]	[mK]
^{13}CCH									
$(1, 3/2, 2, 5/2) \rightarrow (0, 1/2, 1, 3/2)$	84 119.329 F	4.0	1.37×10^{-6}	2.0	6	20.5(7.0)	11.0(0.3)	1.4(0.4)	14*
$(3, 7/2, 4, 9/2) \rightarrow (2, 5/2, 3, 7/2)$	252 422.933 F	24.2	4.75×10^{-5}	4.3	10	114.2(6.6)	10.7(0.1)	3.6(0.3)	34
$(3, 7/2, 4, 7/2) \rightarrow (2, 5/2, 3, 5/2)$	252 424.122 F	24.2	4.63×10^{-5}	3.3	8				
$(3, 7/2, 3, 5/2) \rightarrow (2, 5/2, 2, 3/2)$	252 447.991 F	24.2	4.42×10^{-5}	2.4	6	61.4(8.2)	10.5(0.2)	2.5(0.3)	27
$(3, 7/2, 3, 7/2) \rightarrow (2, 5/2, 2, 5/2)$	252 449.265 F	24.2	4.74×10^{-5}	3.4	8				
$(3, 5/2, 3, 7/2) \rightarrow (2, 3/2, 2, 5/2)$	252 457.865 F	24.2	4.16×10^{-5}	3.0	8	46.9(6.6)	10.4(0.2)	1.6(0.5)	19
$(3, 5/2, 3, 5/2) \rightarrow (2, 3/2, 2, 3/2)$	252 468.774 F	24.2	3.86×10^{-5}	2.1	6	18.4(8.2)	10.3(0.3)	1.4(0.7)	16
$(3, 5/2, 2, 5/2) \rightarrow (2, 3/2, 1, 3/2)$	252 480.925 F	24.2	3.17×10^{-5}	1.7	6	28.3(6.6)	11.0(0.2)	1.4(0.4)	15
$(3, 5/2, 2, 3/2) \rightarrow (2, 3/2, 1, 1/2)$	252 489.308 F	24.2	3.32×10^{-5}	1.2	4	16.0(3.3)	10.6(0.1)	1.4(0.4)	12
C^{13}CH									
$(1, 3/2, 2, 5/2) \rightarrow (0, 1/2, 1, 3/2)$	85 229.326 F	4.1	1.42×10^{-6}	2.0	6	36.3(7.0)	11.0(0.2)	2.2(0.4)	16*
$(3, 7/2, 3, 5/2) \rightarrow (2, 5/2, 2, 5/2)$	255 742.430 F	24.5	3.36×10^{-6}	0.2	6	12.0(6.7)	10.4(0.1)	0.6(0.3)	21
$(3, 7/2, 4, 9/2) \rightarrow (2, 5/2, 3, 7/2)$	255 746.086 F	24.5	4.94×10^{-5}	4.3	10	151.7(15)	10.7(0.1)	3.0(0.4)	47
$(3, 7/2, 4, 7/2) \rightarrow (2, 5/2, 3, 5/2)$	255 747.258 F	24.5	4.83×10^{-5}	3.4	8				
$(3, 7/2, 3, 5/2) \rightarrow (2, 5/2, 2, 3/2)$	255 756.027 F	24.5	4.52×10^{-5}	2.4	6	51.3(16.6)	10.7(0.4)	2.4(0.9)	19
$(3, 7/2, 3, 7/2) \rightarrow (2, 5/2, 2, 5/2)$	255 758.767 F	24.5	4.81×10^{-5}	3.3	8	57.1(18.3)	10.5(0.2)	1.9(0.7)	31
$(3, 5/2, 3, 7/2) \rightarrow (2, 3/2, 2, 5/2)$	255 794.864 F	24.5	4.34×10^{-5}	3.0	8	46.1(11.6)	10.6(0.2)	1.6(0.5)	28
$(3, 5/2, 3, 5/2) \rightarrow (2, 3/2, 2, 3/2)$	255 803.715 F	24.5	4.34×10^{-5}	2.3	6	38.9(15.0)	10.7(0.2)	1.1(0.4)	35
$(3, 5/2, 2, 5/2) \rightarrow (2, 3/2, 1, 3/2)$	255 805.399 F	24.5	3.62×10^{-5}	1.9	6	34.5(20.0)	10.8(0.4)	1.9(0.8)	17

Table B.3. Line parameters of $l\text{-C}_3\text{H}^+$.

Transition	Frequency	E_u	A_{ul}	S_{ij}	g_u	$\int T_{\text{MB}} dv$	Δv	T_{MB}	Notes
$J \rightarrow J - 1$	[MHz]	[K]	[s $^{-1}$]			[K km s $^{-1}$]	[km s $^{-1}$]	[K]	
$4 \rightarrow 3$	89 957.849(0.054) F	10.8	3.389×10^{-5}	4	9	0.12(0.01)	3.25(0.23)	0.033	a
$5 \rightarrow 4$	112 445.713(0.047) F	16.2	6.770×10^{-5}	5	11	0.13(0.01)	2.96(0.32)	0.043	a
$6 \rightarrow 5$	134 932.733(0.010) W	22.7	1.188×10^{-4}	6	13	0.21(0.04)	—	—	b
$7 \rightarrow 6$	157 418.719(0.016) W	30.2	1.907×10^{-4}	7	15	0.16(0.03)	—	—	b
$9 \rightarrow 8$	202 386.776(0.065) F	48.6	4.113×10^{-4}	9	19	0.20(0.01)	2.15(0.13)	0.088	a
$10 \rightarrow 9$	224 868.307(0.114) F	59.4	5.672×10^{-4}	10	21	0.19(0.01)	2.40(0.21)	0.076	a
$11 \rightarrow 10$	247 348.016(0.080) F	71.2	7.582×10^{-4}	11	23	0.14(0.01)	1.68(0.18)	0.080	a
$12 \rightarrow 11$	269 825.838(0.120) F	84.2	9.878×10^{-4}	12	25	0.17(0.02)	2.00(0.28)	0.079	a
$13 \rightarrow 12$	292 301.412(0.065) F	98.2	1.260×10^{-3}	13	27	0.19(0.02)	1.92(0.17)	0.095	a

Notes. $^{(a)}$ Observed frequencies of the detected lines and their uncertainties obtained by fitting Gaussian at 200 kHz spectral resolution and measured in the local standard of rest frame ($v_{\text{LSR}} = 10.7 \text{ km s}^{-1}$ in the Orion Bar PDR). $^{(b)}$ Frequencies and uncertainties reported in [Pety et al. \(2012\)](#).

S. Cuadrado et al.: The chemistry and spatial distribution of small hydrocarbons in UV-irradiated molecular clouds

Table B.4. Line parameters of $I\text{-C}_3\text{H}$.

Transition	Frequency	E_u	A_{ul}	S_{ij}	g_u	$\int T_{\text{MB}} dv$	v_{LSR}	Δv	T_{MB}
$(J^P, F)_u \rightarrow (J^P, F)_l$	[MHz]	[K]	[s ⁻¹]			[mK km s ⁻¹]	[km s ⁻¹]	[km s ⁻¹]	[mK]
$^2\Pi_{1/2} \rightarrow ^2\Pi_{1/2}$									
(9/2 ⁺ , 5 \rightarrow 7/2 ⁻ , 4)	97 995.166 ^F	12.5	6.12×10^{-5}	4.9	11	35.1(3.5)	10.3(0.2)	1.4(0.2)	24
(9/2 ⁺ , 4 \rightarrow 7/2 ⁻ , 3)	97 995.913 ^F	12.5	5.95×10^{-5}	3.9	9	30.1(3.0)	10.2(0.4)	1.4(0.2)	20
(9/2 ⁻ , 5 \rightarrow 7/2 ⁺ , 4)	98 011.611 ^F	12.5	6.13×10^{-5}	4.9	11	28.0(2.8)	10.8(0.2)	1.3(0.2)	20
(9/2 ⁻ , 4 \rightarrow 7/2 ⁺ , 3)	98 012.524 ^F	12.5	5.96×10^{-5}	3.9	9	32.6(3.3)	10.8(0.3)	1.3(0.2)	24
(13/2 ⁻ , 6 \rightarrow 11/2 ⁺ , 5)	149 106.972 ^W	46.1	2.11×10^{-4}	5.6	13	} 178.5(71.4)	–	–	–
(13/2 ⁻ , 7 \rightarrow 11/2 ⁺ , 6)	149 106.972 ^W	46.1	2.14×10^{-4}	6.6	15				
(13/2 ⁺ , 7 \rightarrow 11/2 ⁻ , 6)	149 212.667 ^W	46.2	2.14×10^{-4}	6.6	15	} 58.7(55.5)	–	–	–
(13/2 ⁺ , 6 \rightarrow 11/2 ⁻ , 5)	149 212.667 ^W	46.2	2.12×10^{-4}	5.7	13				
(15/2 ⁺ , 7 \rightarrow 13/2 ⁻ , 6)	171 958.650 ^W	54.4	3.33×10^{-4}	6.7	15	} 87.0(8.7)	–	–	–
(15/2 ⁺ , 8 \rightarrow 13/2 ⁻ , 7)	171 958.650 ^W	54.4	3.36×10^{-4}	7.7	17				
(15/2 ⁻ , 7 \rightarrow 13/2 ⁺ , 6)	172 094.778 ^W	54.4	3.34×10^{-4}	6.7	15	} 48.5(4.8)	–	–	–
(15/2 ⁻ , 8 \rightarrow 13/2 ⁺ , 7)	172 094.778 ^W	54.4	3.37×10^{-4}	7.7	17				
(19/2 ⁺ , 9 \rightarrow 17/2 ⁻ , 8)	217 571.404 ^F	74.2	6.96×10^{-4}	8.8	19	} 57.6(13.4)	10.9(0.2)	1.4(0.3)	39
(19/2 ⁺ , 10 \rightarrow 17/2 ⁻ , 9)	217 571.667 ^F	74.2	7.00×10^{-4}	9.7	21				
(19/2 ⁻ , 9 \rightarrow 17/2 ⁺ , 8)	217 773.402 ^F	74.2	6.98×10^{-4}	8.8	19	} 34.1(7.4)	10.6(0.2)	1.7(0.4)	17
(19/2 ⁻ , 10 \rightarrow 17/2 ⁺ , 9)	217 773.513 ^F	74.2	7.02×10^{-4}	9.7	21				
(27/2 ⁻ , 14 \rightarrow 25/2 ⁺ , 13)	295 172.315 ^F	102.1	1.81×10^{-3}	13.9	29	} 30.0(7.7)	11.1(0.1)	0.6(0.2)	48
(27/2 ⁻ , 13 \rightarrow 25/2 ⁺ , 12)	295 172.315 ^F	102.1	1.81×10^{-3}	12.9	27				
(27/2 ⁺ , 14 \rightarrow 25/2 ⁻ , 13)	295 514.212 ^F	102.2	1.82×10^{-3}	13.9	29	} 54.9(9.7)	10.2(0.1)	1.2(0.3)	41
(27/2 ⁺ , 13 \rightarrow 25/2 ⁻ , 12)	295 514.212 ^F	102.2	1.82×10^{-3}	12.9	27				
$^2\Pi_{3/2} \rightarrow ^2\Pi_{3/2}$									
(9/2 ⁻ , 5 \rightarrow 7/2 ⁺ , 4)	103 319.276 ^F	32.9	6.47×10^{-5}	4.4	11	26.6(2.7)	10.9(0.2)	1.6(0.2)	16
(9/2 ⁻ , 4 \rightarrow 7/2 ⁺ , 3)	103 319.786 ^F	32.9	6.30×10^{-5}	3.5	9	20.2(2.0)	10.2(0.2)	1.4(0.2)	14
(9/2 ⁺ , 5 \rightarrow 7/2 ⁻ , 4)	103 372.483 ^F	32.9	6.49×10^{-5}	4.4	11	} 25.1(2.5)	10.0(0.4)	2.9(0.4)	8
(9/2 ⁺ , 4 \rightarrow 7/2 ⁻ , 3)	103 373.094 ^F	32.9	6.31×10^{-5}	3.5	9				
(13/2 ⁺ , 7 \rightarrow 11/2 ⁻ , 6)	141 635.793 ^W	25.1	1.92×10^{-4}	6.9	15	} 101.1(25.5)	–	–	–
(13/2 ⁺ , 6 \rightarrow 11/2 ⁻ , 5)	141 636.431 ^W	25.1	1.90×10^{-4}	5.9	13				
(13/2 ⁻ , 7 \rightarrow 11/2 ⁺ , 6)	141 708.728 ^W	25.1	1.92×10^{-4}	6.9	15	} 120.7(31.9)	–	–	–
(13/2 ⁻ , 6 \rightarrow 11/2 ⁺ , 5)	141 709.494 ^W	25.1	1.90×10^{-4}	5.9	13				
(15/2 ⁻ , 8 \rightarrow 13/2 ⁺ , 7)	163 491.035 ^W	32.9	2.90×10^{-4}	7.9	17	} 129.9(27.8)	–	–	–
(15/2 ⁻ , 7 \rightarrow 13/2 ⁺ , 6)	163 491.557 ^W	32.9	2.96×10^{-4}	6.9	15				
(15/2 ⁺ , 8 \rightarrow 13/2 ⁻ , 7)	163 597.232 ^W	32.9	3.00×10^{-4}	7.9	17	} 144.6(19.9)	–	–	–
(15/2 ⁺ , 7 \rightarrow 13/2 ⁻ , 6)	163 597.900 ^W	32.9	2.96×10^{-4}	6.9	15				
(19/2 ⁻ , 10 \rightarrow 17/2 ⁺ , 9)	207 279.369 ^F	51.8	6.18×10^{-4}	9.9	21	} 79.3(7.9)	10.5(0.1)	1.4(0.2)	53
(19/2 ⁻ , 9 \rightarrow 17/2 ⁺ , 8)	207 279.779 ^F	51.8	6.14×10^{-4}	8.9	19				
(19/2 ⁺ , 10 \rightarrow 17/2 ⁻ , 9)	207 459.226 ^F	51.8	6.19×10^{-4}	9.9	21	} 98.0(9.8)	10.5(0.2)	2.5(0.4)	37
(19/2 ⁺ , 9 \rightarrow 17/2 ⁻ , 8)	207 459.800 ^F	51.8	6.16×10^{-4}	8.9	19				
(21/2 ⁺ , 11 \rightarrow 19/2 ⁻ , 10)	229 213.636 ^F	62.8	8.40×10^{-4}	10.9	23	} 52.3(13.8)	10.4(0.2)	1.2(0.4)	40
(21/2 ⁺ , 10 \rightarrow 19/2 ⁻ , 9)	229 214.005 ^F	62.8	8.36×10^{-4}	9.9	21				
(21/2 ⁻ , 11 \rightarrow 19/2 ⁺ , 10)	229 432.781 ^F	62.8	8.42×10^{-4}	10.9	23	} 49.8(13.8)	10.5(0.3)	1.2(0.2)	39
(21/2 ⁻ , 10 \rightarrow 19/2 ⁺ , 9)	229 433.316 ^F	62.8	8.38×10^{-4}	9.9	21				
(23/2 ⁻ , 12 \rightarrow 21/2 ⁺ , 11)	251 174.624 ^F	74.8	1.11×10^{-3}	11.9	25	} 53.5(9.8)	10.6(0.1)	1.6(0.3)	32
(23/2 ⁻ , 11 \rightarrow 21/2 ⁺ , 10)	251 174.624 ^F	74.8	1.11×10^{-3}	10.9	23				
(23/2 ⁺ , 12 \rightarrow 21/2 ⁻ , 11)	251 433.892 ^F	74.9	1.11×10^{-3}	11.9	25	} 57.1(9.8)	10.8(0.2)	2.2(0.4)	25
(23/2 ⁺ , 11 \rightarrow 21/2 ⁻ , 10)	251 434.415 ^F	74.9	1.11×10^{-3}	10.9	23				

A&A 575, A82 (2015)

Table B.5. Line parameters of *c*-C₃H.

Transition ($N_{K_a K_c}, J, F$) _u → ($N_{K_a K_c}, J, F$) _l	Frequency [MHz]	E_u [K]	A_{ul} [s ⁻¹]	S_{ij}	g_u	$\int T_{MB} dv$ [mK km s ⁻¹]	v_{LSR} [km s ⁻¹]	Δv [km s ⁻¹]	T_{MB} [mK]
(3 _{1,2} , 5/2, 3) → (3 _{1,3} , 5/2, 3)	85 272.149 ^F	14.9	3.40×10^{-6}	0.6	7	} 21.6(5.9)	10.8(0.2)	1.2(0.4)	17
(3 _{1,2} , 5/2, 2) → (3 _{1,3} , 5/2, 2)	85 272.522 ^F	14.9	3.64×10^{-6}	0.4	5				
(3 _{1,2} , 7/2, 4) → (3 _{1,3} , 7/2, 4)	85 702.495 ^F	14.9	3.89×10^{-6}	0.8	9	7.5(4.7)	10.5(0.4)	0.9(0.6)	8
(2 _{1,2} , 5/2, 3) → (1 _{1,1} , 3/2, 2)	91 494.349 ^F	4.4	1.59×10^{-5}	2.2	7	88.0(9.5)	10.5(0.2)	3.4(0.5)	29
(2 _{1,2} , 5/2, 2) → (1 _{1,1} , 3/2, 1)	91 497.608 ^F	4.4	1.38×10^{-5}	1.3	5	52.4(9.5)	10.5(0.3)	2.9(0.6)	17
(2 _{1,2} , 3/2, 2) → (1 _{1,1} , 1/2, 1)	91 699.471 ^F	4.4	1.37×10^{-5}	1.3	5	52.3(5.9)	10.8(0.3)	2.3(0.7)	21
(2 _{1,2} , 3/2, 2) → (1 _{1,1} , 3/2, 2)	91 780.518 ^F	4.4	2.23×10^{-6}	0.2	5	24.2(5.9)	10.5(0.2)	1.7(0.4)	14
(3 _{1,3} , 7/2, 4) → (2 _{1,2} , 5/2, 3)	132 993.978 ^W	10.8	6.06×10^{-5}	3.5	9	} 227.3(17.6)	–	–	–
(3 _{1,3} , 7/2, 3) → (2 _{1,2} , 5/2, 2)	132 994.679 ^W	10.8	5.75×10^{-5}	2.6	7				
(3 _{1,3} , 5/2, 2) → (2 _{1,2} , 3/2, 1)	133 186.451 ^W	10.8	5.11×10^{-5}	1.6	5	} 252.6(27.7)	–	–	–
(3 _{1,3} , 5/2, 3) → (2 _{1,2} , 3/2, 2)	133 187.717 ^W	10.8	5.70×10^{-5}	2.5	7				
(4 _{1,4} , 9/2, 5) → (3 _{1,3} , 7/2, 4)	172 463.355 ^W	19.1	1.43×10^{-4}	4.6	11	} 32.3(3.2)	–	–	–
(4 _{1,4} , 9/2, 4) → (3 _{1,3} , 7/2, 3)	172 463.718 ^W	19.1	1.39×10^{-4}	3.6	9				
(4 _{1,4} , 7/2, 3) → (3 _{1,3} , 5/2, 2)	172 660.964 ^W	19.1	1.32×10^{-4}	2.7	7	} 218.3(52.5)	–	–	–
(4 _{1,4} , 7/2, 4) → (3 _{1,3} , 5/2, 3)	172 661.526 ^W	19.1	1.38×10^{-4}	3.6	9				
(5 _{1,5} , 11/2, 6) → (4 _{1,4} , 9/2, 5)	211 117.576 ^F	29.2	2.74×10^{-4}	5.6	13	} 182.2(14.6)	10.7(0.1)	2.1(0.2)	82
(5 _{1,5} , 11/2, 5) → (4 _{1,4} , 9/2, 4)	211 117.834 ^F	29.2	2.68×10^{-4}	4.7	11				
(5 _{1,5} , 9/2, 4) → (4 _{1,4} , 7/2, 3)	211 318.450 ^F	29.2	2.61×10^{-4}	3.7	9	} 96.4(13.2)	10.6(0.1)	1.7(0.3)	54
(5 _{1,5} , 9/2, 5) → (4 _{1,4} , 7/2, 4)	211 318.796 ^F	29.2	2.68×10^{-4}	4.7	11				
(4 _{1,3} , 9/2, 5) → (3 _{1,2} , 7/2, 4)	216 488.286 ^F	25.3	2.51×10^{-4}	4.1	11	71.7(8.9)	10.7(0.1)	2.3(0.3)	30
(4 _{1,3} , 9/2, 4) → (3 _{1,2} , 7/2, 3)	216 492.634 ^F	25.3	2.21×10^{-4}	2.9	9	32.4(5.9)	10.9(0.1)	1.3(0.3)	22
(4 _{1,3} , 7/2, 4) → (3 _{1,2} , 5/2, 3)	216 638.258 ^F	25.3	2.26×10^{-4}	3.0	9	42.8(14.8)	10.6(0.1)	1.2(0.2)	29
(4 _{1,3} , 7/2, 3) → (3 _{1,2} , 5/2, 2)	216 641.130 ^F	25.3	2.31×10^{-4}	2.4	7	20.1(16.3)	11.0(0.2)	0.9(0.1)	21
(6 _{1,6} , 13/2, 7) → (5 _{1,5} , 11/2, 6)	249 544.145 ^F	41.2	4.65×10^{-4}	6.7	15	} 125.4(13.0)	10.7(0.1)	1.8(0.2)	66
(6 _{1,6} , 13/2, 6) → (5 _{1,5} , 11/2, 5)	249 544.343 ^F	41.2	4.59×10^{-4}	5.7	13				
(6 _{1,6} , 11/2, 5) → (5 _{1,5} , 9/2, 4)	249 746.630 ^F	41.2	4.50×10^{-4}	4.7	11	} 155.5(17.9)	10.5(0.2)	3.1(0.5)	47
(6 _{1,6} , 11/2, 6) → (5 _{1,5} , 9/2, 5)	249 746.873 ^F	41.2	4.59×10^{-4}	5.7	13				
(5 _{1,4} , 11/2, 6) → (4 _{1,3} , 9/2, 5)	252 697.373 ^F	37.4	4.09×10^{-4}	4.9	13	} 123.6(8.2)	10.5(0.1)	2.5(0.2)	49
(5 _{1,4} , 11/2, 5) → (4 _{1,3} , 9/2, 4)	252 698.198 ^F	37.4	4.01×10^{-4}	4.1	11				
(5 _{1,4} , 9/2, 4) → (4 _{1,3} , 7/2, 3)	252 881.049 ^F	37.4	3.89×10^{-4}	3.2	9	} 72.5(9.9)	10.6(0.1)	1.6(0.3)	44
(5 _{1,4} , 9/2, 5) → (4 _{1,3} , 7/2, 4)	252 881.590 ^F	37.4	4.02×10^{-4}	4.1	11				
(7 _{1,7} , 15/2, 8) → (6 _{1,6} , 13/2, 7)	287 920.669 ^F	55.0	7.28×10^{-4}	7.7	17	} 148.0(16.8)	10.5(0.1)	1.7(0.2)	80
(7 _{1,7} , 15/2, 7) → (6 _{1,6} , 13/2, 6)	287 920.669 ^F	55.0	7.21×10^{-4}	6.8	15				
(7 _{1,7} , 13/2, 6) → (6 _{1,6} , 11/2, 5)	288 124.063 ^F	55.0	7.12×10^{-4}	5.8	13	} 94.5(16.8)	10.6(0.2)	2.0(0.4)	43
(7 _{1,7} , 13/2, 7) → (6 _{1,6} , 11/2, 6)	288 124.063 ^F	55.0	7.22×10^{-4}	6.8	15				
(6 _{1,5} , 13/2, 7) → (5 _{1,4} , 11/2, 6)	289 270.928 ^W	51.3	6.41×10^{-4}	5.9	15	} 78.7(20.6)	–	–	–
(6 _{1,5} , 13/2, 6) → (5 _{1,4} , 11/2, 5)	289 271.481 ^W	51.3	6.32×10^{-4}	5.1	13				
(6 _{1,5} , 11/2, 5) → (5 _{1,4} , 9/2, 4)	289 461.153 ^W	51.3	6.21×10^{-4}	4.2	11	} 39.4(13.1)	–	–	–
(6 _{1,5} , 11/2, 6) → (5 _{1,4} , 9/2, 5)	289 461.805 ^W	51.3	6.33×10^{-4}	5.1	13				

S. Cuadrado et al.: The chemistry and spatial distribution of small hydrocarbons in UV-irradiated molecular clouds

Table B.6. Line parameters of $c\text{-C}_3\text{H}_2$.

Transition ($J_{K_a K_c}$) _u → ($J_{K_a K_c}$) _l	Sym	Frequency [MHz]	E_u [K]	A_{ul} [s ⁻¹]	S_{ij}	g_u	$\int T_{\text{MB}} dv$ [K km s ⁻¹]	v_{LSR} [km s ⁻¹]	Δv [km s ⁻¹]	T_{MB} [K]
4 _{2,2} → 4 _{1,3}	<i>para</i>	80 723.179 ^F	28.8	1.46 × 10 ⁻⁵	1.8	9	0.10(1)	10.56(14)	2.60(41)	0.03
2 _{0,2} → 1 _{1,1}	<i>para</i>	82 093.548 ^F	6.4	2.07 × 10 ⁻⁵	1.4	5	0.55(1)	10.64(2)	2.75(6)	0.19
6 _{6,1} → 6 _{5,2}	<i>ortho</i>	82 583.441 ^F	66.3	1.31 × 10 ⁻⁵	2.2	13	0.01(1)	10.82(32)	0.86(44)	0.01*
3 _{1,2} → 3 _{0,3}	<i>ortho</i>	82 966.196 ^F	13.7	1.09 × 10 ⁻⁵	1.0	7	0.48(1)	10.71(2)	2.61(6)	0.17
3 _{2,2} → 3 _{1,3}	<i>para</i>	84 727.687 ^F	16.1	1.15 × 10 ⁻⁵	1.0	7	0.14(1)	10.79(5)	2.15(11)	0.06
2 _{1,2} → 1 _{0,1}	<i>ortho</i>	85 338.900 ^F	4.1	2.55 × 10 ⁻⁵	1.5	5	2.03(2)	10.72(1)	2.72(2)	0.70
4 _{3,2} → 4 _{2,3}	<i>ortho</i>	85 656.415 ^F	26.7	1.67 × 10 ⁻⁵	1.8	9	0.24(1)	10.75(3)	2.20(8)	0.10
5 _{4,2} → 5 _{3,3}	<i>para</i>	87 435.317 ^F	45.3	2.04 × 10 ⁻⁵	2.5	11	0.04(1)	10.72(16)	2.01(73)	0.02
6 _{5,2} → 6 _{4,3}	<i>ortho</i>	90 344.081 ^F	62.4	2.38 × 10 ⁻⁵	3.1	13	0.04(1)	10.72(21)	1.92(54)	0.02
7 _{4,3} → 7 _{3,4}	<i>ortho</i>	112 490.768 ^F	80.3	4.50 × 10 ⁻⁵	3.5	15	0.05(1)	10.69(14)	0.98(41)	0.02
3 _{0,3} → 2 _{1,2}	<i>ortho</i>	117 151.183 ^W	9.7	7.67 × 10 ⁻⁵	2.4	7	2.51(15)	—	—	—
3 _{1,3} → 2 _{0,2}	<i>para</i>	117 546.231 ^W	12.1	7.77 × 10 ⁻⁵	2.5	7	0.74(6)	—	—	—
3 _{1,2} → 2 _{2,1}	<i>ortho</i>	145 089.611 ^W	13.7	7.44 × 10 ⁻⁵	1.3	7	1.30(11)	—	—	—
2 _{2,0} → 1 _{1,1}	<i>para</i>	150 436.558 ^W	9.7	5.89 × 10 ⁻⁵	0.6	5	0.32(6)	—	—	—
4 _{0,4} → 3 _{1,3}	<i>para</i>	150 820.665 ^W	19.3	1.80 × 10 ⁻⁴	3.5	9	1.00(4)	—	—	—
4 _{1,4} → 3 _{0,3}	<i>ortho</i>	150 851.898 ^W	17.0	1.80 × 10 ⁻⁴	3.5	9	3.00(19)	—	—	—
6 _{2,4} → 6 _{1,5}	<i>para</i>	150 954.689 ^W	54.7	6.87 × 10 ⁻⁵	1.9	13	0.06(2)	—	—	—
6 _{3,4} → 6 _{2,5}	<i>ortho</i>	151 039.149 ^W	52.4	6.88 × 10 ⁻⁵	1.9	13	0.20(3)	—	—	—
5 _{1,4} → 5 _{0,5}	<i>ortho</i>	151 343.875 ^W	33.1	4.35 × 10 ⁻⁵	1.0	11	0.34(4)	—	—	—
5 _{2,4} → 5 _{1,5}	<i>para</i>	151 361.102 ^W	35.4	4.35 × 10 ⁻⁵	1.0	11	0.09(2)	—	—	—
3 _{2,2} → 2 _{1,1}	<i>para</i>	155 518.308 ^W	16.1	1.23 × 10 ⁻⁴	1.7	7	0.68(4)	—	—	—
4 _{2,2} → 3 _{2,1}	<i>para</i>	204 788.929 ^F	28.8	1.37 × 10 ⁻⁴	1.0	9	0.20(1)	10.83(5)	2.03(14)	0.09
3 _{3,0} → 2 _{2,1}	<i>ortho</i>	216 278.738 ^F	17.1	2.81 × 10 ⁻⁴	1.4	7	1.29(1)	10.74(9)	2.29(2)	0.53
6 _{0,6} → 5 _{1,5}	<i>para</i>	217 822.057 ^F	38.6	5.93 × 10 ⁻⁴	5.5	13	} 3.14(1)	10.75(1)	2.18(1)	1.35
6 _{1,6} → 5 _{0,5}	<i>ortho</i>	217 822.180 ^F	36.3	5.93 × 10 ⁻⁴	5.5	13				
5 _{1,4} → 4 _{2,3}	<i>ortho</i>	217 940.045 ^F	33.1	4.43 × 10 ⁻⁴	3.4	11	1.60(1)	10.78(1)	2.13(1)	0.70
5 _{2,4} → 4 _{1,3}	<i>para</i>	218 160.462 ^F	35.4	4.44 × 10 ⁻⁴	3.4	11	0.56(1)	10.79(2)	2.20(4)	0.24
8 _{2,6} → 8 _{1,7}	<i>para</i>	218 448.823 ^F	86.9	1.64 × 10 ⁻⁴	2.0	17	} 0.10(1)	10.75(10)	2.27(25)	0.04
8 _{3,6} → 8 _{2,7}	<i>ortho</i>	218 449.400 ^F	84.6	1.64 × 10 ⁻⁴	2.0	17				
7 _{1,6} → 7 _{0,7}	<i>ortho</i>	218 732.683 ^F	58.8	9.82 × 10 ⁻⁵	1.0	15	} 0.16(1)	10.75(5)	2.07(11)	0.07
7 _{2,6} → 7 _{1,7}	<i>para</i>	218 732.767 ^F	61.2	9.82 × 10 ⁻⁵	1.0	15				
4 _{3,2} → 3 _{2,1}	<i>ortho</i>	227 169.143 ^F	26.7	3.43 × 10 ⁻⁴	1.9	9	1.10(2)	10.74(2)	2.11(5)	0.49
3 _{2,1} → 2 _{1,2}	<i>ortho</i>	244 222.155 ^F	15.8	6.49 × 10 ⁻⁵	0.2	7	0.38(2)	10.76(5)	2.23(13)	0.16
5 _{2,3} → 4 _{3,2}	<i>ortho</i>	249 054.415 ^F	38.7	4.57 × 10 ⁻⁴	2.4	11	0.79(1)	10.80(1)	1.93(4)	0.39
7 _{0,7} → 6 _{1,6}	<i>ortho</i>	251 314.362 ^F	48.3	9.35 × 10 ⁻⁴	6.5	15	} 2.22(1)	10.78(1)	1.98(1)	1.05
7 _{1,7} → 6 _{0,6}	<i>para</i>	251 314.369 ^F	50.7	9.35 × 10 ⁻⁴	6.5	15				
6 _{1,5} → 5 _{2,4}	<i>para</i>	251 508.713 ^F	47.5	7.42 × 10 ⁻⁴	4.4	13	0.37(1)	10.76(2)	1.82(6)	0.19
6 _{2,5} → 5 _{1,4}	<i>ortho</i>	251 527.325 ^F	45.1	7.42 × 10 ⁻⁴	4.4	13	1.16(1)	10.80(1)	2.00(2)	0.55
10 _{3,7} → 10 _{2,8}	<i>para</i>	251 773.193 ^F	137.6	2.98 × 10 ⁻⁴	2.9	21	} 0.02(1)	10.75(13)	0.93(23)	0.02*
10 _{4,7} → 10 _{3,8}	<i>ortho</i>	251 773.421 ^F	135.3	2.98 × 10 ⁻⁴	2.9	21				
8 _{1,7} → 8 _{0,8}	<i>para</i>	252 409.829 ^F	76.5	1.34 × 10 ⁻⁴	1.0	17	} 0.10(1)	10.76(1)	2.01(26)	0.05
8 _{2,7} → 8 _{1,8}	<i>ortho</i>	252 409.834 ^F	74.1	1.34 × 10 ⁻⁴	1.0	17				

A&A 575, A82 (2015)

Table B.6. continued.

Transition ($J_{K_a K_c}$) _u → ($J_{K_a K_c}$) _l	Sym	Frequency [MHz]	E_u [K]	A_{ul} [s ⁻¹]	S_{ij}	g_u	$\int T_{MB} dv$ [K km s ⁻¹]	v_{LSR} [km s ⁻¹]	Δv [km s ⁻¹]	T_{MB} [K]
$5_{3,3} \rightarrow 4_{2,2}$	<i>para</i>	254 987.657 ^F	41.1	5.17×10^{-4}	2.5	11	0.31(1)	10.72(4)	2.18(10)	0.13
$5_{3,2} \rightarrow 4_{4,1}$	<i>ortho</i>	260 479.764 ^W	42.4	1.77×10^{-4}	0.8	11	0.25(8)	—	—	—
$4_{4,1} \rightarrow 3_{3,0}$	<i>ortho</i>	265 759.483 ^F	29.9	7.99×10^{-4}	2.8	9	0.94(1)	10.79(1)	1.94(3)	0.46
$4_{4,0} \rightarrow 3_{3,1}$	<i>para</i>	282 381.108 ^F	32.5	8.11×10^{-4}	2.37	9	0.42(2)	10.80(4)	2.09 (10)	0.19
$8_{0,8} \rightarrow 7_{1,7}$	<i>para</i>	284 805.229 ^F	64.3	1.39×10^{-3}	7.45	17	} 2.05(2)	10.64(1)	2.21(3)	0.87
$8_{1,8} \rightarrow 7_{0,7}$	<i>ortho</i>	284 805.230 ^F	62.0	1.39×10^{-3}	7.45	17				
$6_{2,4} \rightarrow 5_{3,3}$	<i>para</i>	284 913.028 ^F	54.7	8.38×10^{-4}	3.44	13	0.26(2)	10.65(8)	2.19(21)	0.11
$7_{1,6} \rightarrow 6_{2,5}$	<i>ortho</i>	284 998.025 ^F	58.8	1.15×10^{-3}	5.42	15	} 1.50(2)	10.38(2)	2.82(5)	0.50
$7_{2,6} \rightarrow 6_{1,5}$	<i>para</i>	284 999.377 ^F	61.2	1.15×10^{-3}	5.42	15				
$6_{3,4} \rightarrow 5_{2,3}$	<i>ortho</i>	285 795.689 ^F	52.4	8.49×10^{-4}	3.45	13	0.79(2)	10.65(3)	2.17(7)	0.34
$5_{4,2} \rightarrow 4_{3,1}$	<i>para</i>	300 191.723 ^F	45.3	7.61×10^{-4}	2.26	11	0.28(3)	11.13(17)	3.01(41)	0.09
$5_{5,0} \rightarrow 4_{4,1}$	<i>ortho</i>	349 264.002 ^F	46.6	1.81×10^{-3}	3.41	11	0.63(5)	10.60(12)	3.11(38)	0.19
$7_{3,4} \rightarrow 6_{4,3}$	<i>ortho</i>	351 523.296 ^F	74.9	1.36×10^{-3}	3.43	15	0.26(5)	10.86(19)	1.91(45)	0.13
$10_{1,10} \rightarrow 9_{0,9}$	<i>ortho</i>	351 781.573 ^F	94.1	2.68×10^{-3}	9.45	21	} 0.79(6)	10.61(7)	1.87(15)	0.40
$10_{0,10} \rightarrow 9_{1,9}$	<i>para</i>	351 781.573 ^F	96.5	2.68×10^{-3}	9.45	21				
$9_{1,8} \rightarrow 8_{2,7}$	<i>ortho</i>	351 965.963 ^F	91.0	2.33×10^{-3}	7.41	19	} 0.49(5)	10.54(7)	1.50(15)	0.31
$9_{2,8} \rightarrow 8_{1,7}$	<i>para</i>	351 965.969 ^F	93.3	2.33×10^{-3}	7.41	19				
$8_{3,6} \rightarrow 7_{2,5}$	<i>ortho</i>	352 193.664 ^F	84.6	1.91×10^{-3}	5.42	17	0.35(5)	10.74(13)	1.60(16)	0.21

Table B.7. Line parameters of *l*-H₂C₃.

Transition ($J_{K_a K_c}$) _u → ($J_{K_a K_c}$) _l	Sym	Frequency [MHz]	E_u [K]	A_{ul} [s ⁻¹]	S_{ij}	g_u	$\int T_{MB} dv$ [mK km s ⁻¹]	v_{LSR} [km s ⁻¹]	Δv [km s ⁻¹]	T_{MB} [mK]
$4_{1,4} \rightarrow 3_{1,3}$	<i>ortho</i>	82 395.089 ^F	8.9	4.56×10^{-5}	3.8	9	65.5(9.3)	10.7(0.1)	2.1(0.4)	29
$4_{0,4} \rightarrow 3_{0,3}$	<i>para</i>	83 165.345 ^F	10.0	5.00×10^{-5}	4.0	9	22.8(9.3)	10.5(0.6)	2.8(1.1)	8*
$4_{1,3} \rightarrow 3_{1,2}$	<i>ortho</i>	83 933.699 ^F	9.1	4.82×10^{-5}	3.8	9	75.2(8.2)	10.7(0.2)	2.0(0.4)	29
$5_{1,5} \rightarrow 4_{1,4}$	<i>ortho</i>	102 992.379 ^F	13.8	9.33×10^{-5}	4.8	11	67.5(8.4)	10.5(0.2)	2.7(0.4)	26
$5_{0,5} \rightarrow 4_{0,4}$	<i>para</i>	103 952.926 ^F	15.0	9.99×10^{-5}	5.0	11	28.5(7.2)	10.8(0.3)	2.5(0.8)	11
$5_{1,4} \rightarrow 4_{1,3}$	<i>ortho</i>	104 915.583 ^F	14.1	9.86×10^{-5}	4.8	11	91.3(8.4)	10.5(0.2)	3.7(0.4)	23
$7_{1,7} \rightarrow 6_{1,6}$	<i>ortho</i>	144 183.804 ^W	26.7	2.68×10^{-4}	6.9	15	96.9(30.7)	—	—	—
$7_{1,6} \rightarrow 6_{1,5}$	<i>ortho</i>	146 876.061 ^W	27.2	2.83×10^{-4}	6.9	15	105.6(33.4)	—	—	—
$8_{1,8} \rightarrow 7_{1,7}$	<i>ortho</i>	164 777.547 ^W	34.6	4.06×10^{-4}	7.9	17	78.9(25.2)	—	—	—
$8_{1,7} \rightarrow 7_{1,6}$	<i>ortho</i>	167 854.234 ^W	35.3	4.29×10^{-4}	7.9	17	110.2(21.3)	—	—	—
$10_{1,10} \rightarrow 9_{1,9}$	<i>ortho</i>	205 960.125 ^F	53.4	8.06×10^{-4}	9.9	21	65.0(13.0)	10.7(0.2)	1.7(0.5)	36
$10_{0,10} \rightarrow 9_{0,9}$	<i>para</i>	207 843.289 ^F	54.9	8.37×10^{-4}	10.0	21	27.8(8.7)	10.7(0.2)	1.5(0.4)	17*
$10_{1,9} \rightarrow 9_{1,8}$	<i>ortho</i>	209 805.427 ^F	54.4	8.52×10^{-4}	9.9	21	80.4(17.5)	10.7(0.2)	2.2(0.5)	35
$11_{1,11} \rightarrow 10_{1,10}$	<i>ortho</i>	226 548.575 ^F	64.3	1.08×10^{-3}	10.9	23	65.4(18.3)	10.6(0.2)	1.6(0.4)	50
$12_{0,12} \rightarrow 11_{0,11}$	<i>para</i>	249 367.939 ^F	77.8	1.46×10^{-3}	12.0	25	95.8(14.7)	10.9(0.2)	2.5(0.5)	36*
$12_{1,11} \rightarrow 11_{1,10}$	<i>ortho</i>	251 748.328 ^F	77.6	1.49×10^{-3}	11.9	25	37.2(9.9)	10.7(0.1)	1.0(0.3)	36
$13_{0,13} \rightarrow 12_{0,12}$	<i>para</i>	270 121.513 ^W	90.8	1.86×10^{-3}	13.0	27	14.5(2.9)*	—	—	—
$13_{1,12} \rightarrow 12_{1,11}$	<i>ortho</i>	272 716.158 ^F	90.6	1.90×10^{-3}	12.9	27	35.9(8.8)	10.9(0.1)	1.0(0.2)	34*

S. Cuadrado et al.: The chemistry and spatial distribution of small hydrocarbons in UV-irradiated molecular clouds

Table B.8. Line parameters of C₄H.

Transition	Frequency	E_u	A_{ul}	S_{ij}	g_u	$\int T_{MB} dv$	v_{LSR}	Δv	T_{MB}
$(N, J)_u \rightarrow (N, J)_l$	[MHz]	[K]	[s ⁻¹]			[K km s ⁻¹]	[km s ⁻¹]	[km s ⁻¹]	[K]
(9, 19/2) → (8, 17/2)	85 634.023 ^F	20.5	2.63×10^{-6}	9.5	20	0.21(1)	10.55(5)	2.66(13)	0.074
(9, 17/2) → (8, 15/2)	85 672.563 ^F	20.6	2.62×10^{-6}	8.5	18	0.19(1)	10.46(5)	2.61(12)	0.067
(10, 21/2) → (9, 19/2)	95 150.402 ^F	25.1	3.62×10^{-6}	10.5	22	0.20(1)	10.55(5)	2.61(13)	0.071
(10, 19/2) → (9, 17/2)	95 188.935 ^F	25.1	3.61×10^{-6}	9.5	20	0.19(1)	10.31(7)	2.90(17)	0.061
(11, 23/2) → (10, 21/2)	104 666.575 ^F	30.1	4.84×10^{-6}	11.5	24	0.21(1)	10.61(4)	2.60(10)	0.078
(11, 21/2) → (10, 19/2)	104 705.099 ^F	30.2	4.83×10^{-6}	10.5	22	0.20(1)	10.59(6)	2.84(16)	0.066
(12, 25/2) → (11, 23/2)	114 182.520 ^F	35.6	6.31×10^{-6}	12.5	26	0.25(2)	10.70(8)	2.51(21)	0.093
(12, 23/2) → (11, 21/2)	114 221.035 ^F	35.6	6.29×10^{-6}	11.5	24	0.23(1)	10.72(6)	2.42(14)	0.100
(14, 29/2) → (13, 27/2)	133 213.644 ^W	47.9	1.01×10^{-5}	14.5	30	0.27(5)	–	–	–
(14, 27/2) → (13, 25/2)	133 252.140 ^W	48.0	1.01×10^{-5}	13.5	28	0.26(6)	–	–	–
(15, 31/2) → (14, 29/2)	142 728.783 ^W	54.8	1.24×10^{-5}	15.5	32	0.23(5)	–	–	–
(15, 29/2) → (14, 27/2)	142 767.267 ^W	54.8	1.24×10^{-5}	14.5	30	0.28(4)	–	–	–
(16, 33/2) → (15, 31/2)	152 243.611 ^W	62.1	1.51×10^{-5}	16.5	34	0.21(3)	–	–	–
(16, 31/2) → (15, 29/2)	152 282.083 ^W	62.1	1.51×10^{-5}	15.5	32	0.30(4)	–	–	–
(17, 35/2) → (16, 33/2)	161 758.109 ^W	69.9	1.81×10^{-5}	17.5	36	0.26(4)	–	–	–
(17, 33/2) → (16, 31/2)	161 796.568 ^W	69.9	1.81×10^{-5}	16.5	34	0.24(3)	–	–	–
(18, 37/2) → (17, 35/2)	171 272.255 ^W	78.1	2.16×10^{-5}	18.5	38	0.16(3)	–	–	–
(18, 35/2) → (17, 33/2)	171 310.702 ^W	78.1	2.15×10^{-5}	17.5	36	^(s)	–	–	–
(22, 45/2) → (21, 43/2)	209 324.922 ^F	115.5	3.95×10^{-5}	22.5	46	0.25(1)	10.78(4)	2.04(10)	0.117
(22, 43/2) → (21, 41/2)	209 363.306 ^F	115.6	3.95×10^{-5}	21.5	44	0.26(1)	10.68(4)	2.35(12)	0.104
(23, 47/2) → (22, 45/2)	218 837.007 ^F	126.0	4.52×10^{-5}	23.5	48	0.23(1)	10.82(4)	2.15(10)	0.101
(23, 45/2) → (22, 43/2)	218 875.374 ^F	126.1	4.52×10^{-5}	22.5	46	0.21(1)	10.72(4)	1.84(10)	0.106
(24, 49/2) → (23, 47/2)	228 348.618 ^F	137.0	5.14×10^{-5}	24.5	50	0.20(2)	10.76(9)	2.08(24)	0.092
(24, 47/2) → (23, 45/2)	228 386.966 ^F	137.0	5.14×10^{-5}	23.5	48	0.17(2)	10.69(13)	2.35(35)	0.068
(25, 51/2) → (24, 49/2)	237 859.735 ^F	148.4	5.81×10^{-5}	25.5	52	0.16(2)	10.84(9)	1.62(28)	0.090
(25, 49/2) → (24, 47/2)	237 898.065 ^F	148.5	5.81×10^{-5}	24.5	50	0.21(2)	10.65(11)	2.27(27)	0.087
(26, 53/2) → (25, 51/2)	247 370.338 ^F	160.3	6.54×10^{-5}	26.5	54	0.20(1)	10.89(6)	1.96(15)	0.094
(26, 51/2) → (25, 49/2)	247 408.648 ^F	160.3	6.54×10^{-5}	25.5	52	0.20(1)	10.71(6)	2.19(15)	0.084
(27, 55/2) → (26, 53/2)	256 880.407 ^F	172.6	7.33×10^{-5}	27.5	56	0.19(2)	10.83(7)	1.70(20)	0.104
(27, 53/2) → (26, 51/2)	256 918.696 ^F	172.7	7.33×10^{-5}	26.5	54	0.18(1)	10.75(7)	2.08(17)	0.082
(28, 57/2) → (27, 55/2)	266 389.921 ^F	185.4	8.18×10^{-5}	28.5	58	0.14(1)	10.85(8)	1.96(18)	0.067
(28, 55/2) → (27, 53/2)	266 428.190 ^F	185.5	8.18×10^{-5}	27.5	56	0.12(1)	10.60(8)	1.90(20)	0.057
(29, 59/2) → (28, 57/2)	275 898.861 ^F	198.6	9.10×10^{-5}	29.5	60	0.17(2)	10.73(8)	1.60(22)	0.102
(29, 57/2) → (28, 55/2)	275 937.107 ^F	198.7	9.10×10^{-5}	28.5	58	0.15(2)	10.67(10)	1.76(27)	0.081
(30, 61/2) → (29, 59/2)	285 407.207 ^F	212.3	1.01×10^{-4}	30.5	62	0.15(2)	10.53(15)	2.30(32)	0.062
(30, 59/2) → (29, 57/2)	285 445.430 ^F	212.4	1.01×10^{-4}	29.5	60	0.14(3)	10.52(34)	2.50(59)	0.052
(31, 63/2) → (30, 61/2)	294 914.937 ^F	226.5	1.11×10^{-4}	31.5	64	0.11(1)	10.59(7)	1.89(23)	0.105
(31, 61/2) → (30, 59/2)	294 953.137 ^F	226.6	1.11×10^{-4}	30.5	62	0.06(1)	10.74(10)	1.45(24)	0.074
(32, 65/2) → (31, 63/2)	304 422.034 ^F	241.1	1.22×10^{-4}	32.5	66	0.16(2)	10.38(18)	2.17(50)	0.068*
(32, 63/2) → (31, 61/2)	304 460.209 ^F	241.2	1.22×10^{-4}	31.5	64	0.11(4)	10.95(37)	1.90(32)	0.056*

Capítulo 8

Moléculas orgánicas complejas

8.1. COMs en el medio interestelar

Las moléculas orgánicas complejas (COMs, de sus siglas en inglés) se han definido tradicionalmente como moléculas basadas en carbono con seis o más átomos en su estructura (Herbst & van Dishoeck 2009; Caselli & Ceccarelli 2012). A diferencia de los hidrocarburos, las COMs pueden contener otros átomos en su estructura, como oxígeno, azufre o nitrógeno. Hasta la fecha se han detectado casi 200 moléculas en el medio interestelar y circunestelar,¹ y una fracción muy grande de ellas son COMs: alcoholes (e.g. CH_3OH , CH_2CHOH , $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$, $(\text{CH}_2\text{OH})_2$), aldehídos (e.g. HCCCHO , CH_3COH , CH_2CHCHO , $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CHO}$), éteres (e.g. CH_3OCH_3 , $\text{C}_2\text{H}_5\text{OCH}_3$), cetonas (e.g. $\text{CH}_3\text{C}(\text{O})\text{CH}_3$) ésteres (e.g. $\text{HC}(\text{O})\text{OCH}_3$, $\text{CH}_3\text{C}(\text{O})\text{OCH}_3$), aminas (e.g. CH_3NH_2), iminas (e.g. CH_2NH , CH_3CHNH), amidas (e.g. $\text{HC}(\text{O})\text{NH}_2$, $\text{CH}_3\text{C}(\text{O})\text{NH}_2$), cianopoliinos (e.g. HC_nN , con $n = 3, 5, 7$ y 9), nitrilos (e.g. CH_3CN , CH_3NC , CH_2CHCN , $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CN}$, CH_2CCHCN) o tioles (e.g. CH_3SH , $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{SH}$). Se han observado en el medio interestelar desde los años 70 (e.g. CH_3CHO , Gottlieb 1973; HCOOCH_3 , Brown et al. 1975) y hasta ahora, las moléculas orgánicas más grandes detectadas (excluyendo los PAHs y los fullerenos) son el cianuro de propilo ($\text{C}_3\text{H}_7\text{CN}$, Belloche et al. 2009, 2014) y el benceno ($\text{c-C}_6\text{H}_6$; Cernicharo et al. 2001).

Las COMs se detectan en muchos ambientes intereste-

lares y circunestelares, como por ejemplo en **envolturas alrededor de estrellas evolucionadas** (e.g. IRC+10216, Cernicharo et al. 2000), en **fuentes extragalácticas** (e.g. Meier & Turner 2005, 2012, Aladro et al. 2011), **meteoritos** (e.g. Cronin & Chang 1993) y **cometas** (e.g. Bockelée-Morvan et al. 2004). Pero son especialmente abundantes en **hot cores** (como Sgr B2 y Orión KL, e.g. Bisschop et al. 2007, Ziurys & McGonagle 1993, Tercero et al. 2013, 2015, Ikeda et al. 2001) y **hot corinos** (como IRAS 16293–2422, e.g. Cazaux et al. 2003 y NGC 1333 IRAS 4A, e.g. Bottinelli et al. 2004). Se cree que el alto grado de complejidad química observado en estas fuentes protoestelares (e.g. $\text{C}_2\text{H}_5\text{CN}$, CH_3CCH , HCOOCH_3 , CH_3OCH_3 ...) es el resultado de la desorción térmica de los mantos de hielo que recubren los granos de polvo (ver e.g. Herbst & van Dishoeck 2009) y posteriores reacciones químicas en fase gas a alta temperatura. Sin embargo, aún no se conoce con exactitud la importancia relativa de las reacciones en fase gas que se producen inmediatamente después de la sublimación del manto de hielo en comparación con la formación de COMs en la superficie de los granos.

Existen otros procesos no térmicos que liberan las moléculas complejas de los mantos de hielo, como por ejemplo la desorción química, la desorción directa por impactos de rayos cósmicos o los procesos inducidos por fotones secundarios. Estos procesos son probablemente los res-

¹<https://www.astro.uni-koeln.de/cdms/molecules>

ponsables de las altas abundancias de COMs encontradas también en los **núcleos fríos protegidos de la radiación UV estelar**, como por ejemplo en TMC1, L1689B o Barnard 1–b (e.g. Remijan et al. 2006, Bacmann et al. 2012, Cernicharo et al. 2012).

Los choques producidos entre los **flujos protoestelares** y la nube envolvente también pueden erosionar los granos de polvo, y debido a las altas temperaturas alcanzadas, los mantos helados se pueden sublimar. Cuando los choques se producen a una velocidad lo suficientemente alta, los hielos también pueden ser pulverizados e inyectados directamente en la fase gaseosa (e.g. $v_S > 20 - 25 \text{ km s}^{-1}$ para el hielo de agua; Draine et al. 1983). Son ejemplos de flujos protoestelares: L1157, donde se han detectado H_2CO , H_2CS , CH_3OH , HC_3N , HNCO , NH_2CHO y CH_3CHO (Bachiller & Pérez Gutiérrez 1997; Mendoza et al. 2014; Codella et al. 2015), y las nubes densas del centro galáctico donde se cree que la presencia de CH_3OH , HCOOCH_3 y CH_3OCH_3 es el resultado de choques generalizados en la región (e.g. Requena-Torres et al. 2006).

Recientemente se ha empezado a investigar la presen-

cia y formación de COMs en **ambientes iluminados por radiación FUV**. Guzmán et al. (2014) y Gratier et al. (2013) detectaron t-HCOOH , CH_2CO , CH_3CN , CH_3OH , CH_3CHO y CH_3CCH en la PDR de Cabeza de Caballo (una PDR densa con un flujo FUV relativamente bajo, $\chi \approx 60$). Estos autores determinaron que las abundancias calculadas en la PDR iluminada eran mayores que las de una condensación fría cercana protegida de la radiación FUV. Guzmán et al. (2014) propusieron que los procesos de fotodesorción en los mantos de hielo dominan la formación de COMs en Cabeza de Caballo. En las nubes translúcidas de densidad más baja (donde $\chi \approx 1$), la molécula más compleja detectada es H_2CO (Liszt et al. 2006), precursora de COMs. Estas observaciones podrían sugerir que, en ambientes irradiados con flujos FUV, la presencia de COMs disminuye a medida que aumenta la relación χ/n_{H} . Por lo tanto, las COMs podrían no estar presentes en el gas fuertemente irradiado con flujos FUV.

En este Capítulo se pone a prueba la hipótesis anterior y se investiga la presencia y abundancia de COMs en el frente de disociación de la Barra de Orión. Este trabajo ha sido publicado en Cuadrado et al. 2017 (ver Sección 8.3).

8.2. Análisis y principales resultados

A pesar de que el borde irradiado de la PDR de la Barra de Orión es un ambiente hostil donde no se esperaría encontrar altas abundancias de moléculas complejas, nuestras observaciones muestran espectros relativamente ricos con más de 250 líneas pertenecientes a COMs y a sus precursores: HCO , HNCO , H_2CO , H_2CS , CH_2NH , H_2CCO , HC_3N , CH_3OH , CH_3CN y CH_3CHO . También se han detectado varias líneas del isotópologo H_2^{13}CO . Entre las moléculas orgánicas detectadas, se identificaron varias líneas del ácido fórmico, los conformeros trans y cis- HCOOH . En Cuadrado et al. (2016) se presenta la primera detección del conformero cis de HCOOH en el medio interestelar así como un análisis detallado de las líneas detectadas de ambos conformeros en la banda espectral de 3 mm (ver Capítulo 8).

A continuación se resumen los principales resultados extraídos del análisis de las observaciones:

- Se presenta la primera detección de las moléculas CH_2NH , HC_3N , CH_3CN y CH_3CHO en la Barra de Orión.
- Se han ajustado todas las líneas con perfiles Gaussianos usando el software CLASS obteniendo sus intensidades integradas de línea, anchuras, velocidades LSR y temperaturas de antena. Para las líneas resueltas espectralmente y sin solapamientos detectadas con una relación S/N significativa, el ancho medio de las líneas de las moléculas estudiadas es $\Delta v = 1.8 \text{ km s}^{-1}$, con una desviación estándar de $\sigma = 0.6 \text{ km s}^{-1}$. Los perfiles de línea tienen una velocidad LSR entre $v_{\text{LSR}} = 10 - 11 \text{ km s}^{-1}$, que se corresponde con la velocidad de la Barra, confirmando así su origen en la PDR.
- Se ha determinado la temperatura de rotación (T_{rot}) y la densidad de columna (N) de las especies detectadas con la construcción de diagramas rotacionales (ver Capítulo 4.1).

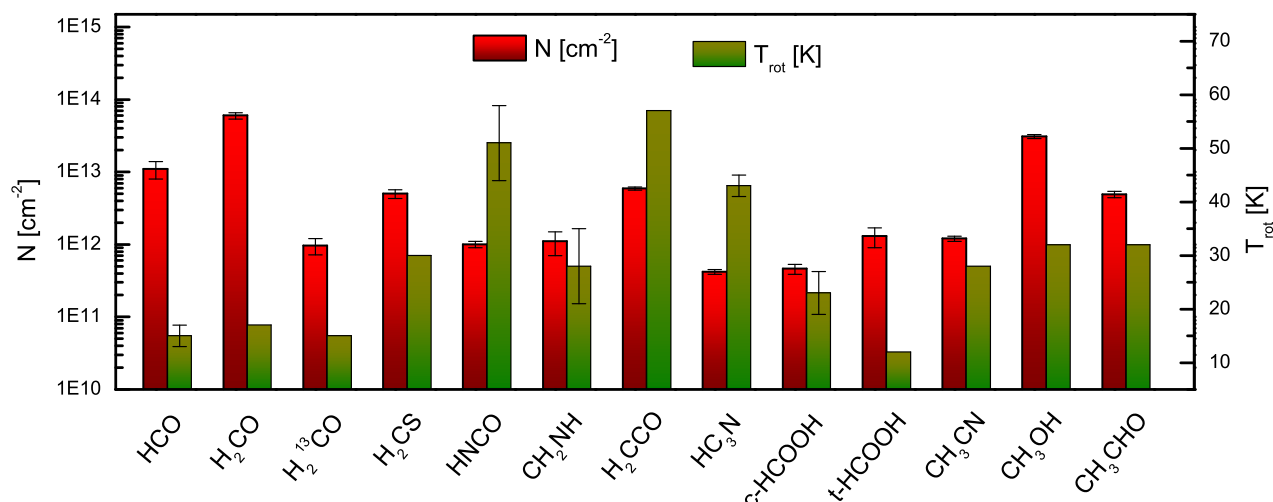


Figura 8.1: Densidades de columna (histograma verde; eje izquierdo) y temperaturas rotacionales (histograma rojo; eje derecho) de las moléculas orgánicas complejas (y precursores) detectadas en el frente de disociación de Barra de Orión.

El gran número de líneas detectadas de cada molécula permite determinar estos dos parámetros con precisión. Los diagramas de rotación se han calculado para dos casos límite: (i) suponiendo que la emisión es extensa (llenado uniforme del haz del telescopio) con $\eta_{\text{bf}} = 1$, y (ii) suponiendo que la fuente tiene un tamaño de $\theta_s = 9''$ (fuente semi-extensa), que se corresponde con el tamaño del haz del telescopio IRAM-30m a ~ 1 mm.

Debido a la compleja espectroscopía de algunas moléculas orgánicas y a las condiciones de excitación predominantes en la Barra (excitación subtérmica, $T_{\text{rot}} \ll T_k$), la correcta determinación de las densidades de columna para especies simétricas y asimétricas como H₂CO, H₂CS, H₂CCO, CH₃OH y CH₃CN requiere construir diagramas rotacionales específicos para cada escalera rotacional.

Del análisis de los diagramas de rotación (Fig. 8.1) se obtienen los siguientes resultados:

1. las moléculas orgánicas más abundantes son H₂CO y CH₃OH (por un factor $\gtrsim 5$), seguido de HCO, H₂CCO, CH₃CHO, H₂CS, HCOOH, CH₃CN, CH₂NH, HNCO, H₂¹³CO y HC₃N (en orden decreciente de abundancia).
2. Se han obtenido temperaturas de rotación bajas (< 30 K) para la mayoría de las moléculas, excepto

para HC₃N y HNCO (> 40 K), mucho menores que la temperatura del gas, lo que es consistente con una excitación subtérmica.

3. Se ha calculado una relación orto/para de ~ 3 a partir de las densidades de columna de H₂CO, H₂¹³CO, H₂CS, H₂CCO.
4. Se han obtenido temperaturas de rotación similares para cada especie orto-para y A-E.
5. El ratio $[\text{H}_2\text{CO}]/[\text{H}_2^{13}\text{CO}]$ inferido es 63 ± 3 , similar al ratio $^{12}\text{C}/^{13}\text{C} \approx 67$ estimado en Orión (Langer & Penzias 1990). Por lo tanto, incluso las líneas de las especies orgánicas más abundantes estudiadas en este trabajo son ópticamente delgadas.

■ Para confirmar la correcta identificación de las líneas y comprobar que no existen solapamientos, se ha modelado el espectro de cada molécula usando el código de transferencia radiativa MADEX asumiendo una distribución de Boltzmann y una temperatura de excitación para la población de niveles rotacionales.

■ A partir de las densidades de columna se ha calculado un rango de abundancias (para los dos casos límite mencionados anteriormente) para cada especie. La abundancia de las moléculas detectadas está dentro de un rango de $10^{-9} - 10^{-11}$.

■ Se han estimado las condiciones físicas (promediadas dentro del haz del telescopio) de la posición observada de la Barra a partir de modelos de excitación no-LTE LVG con MADEX para aquellas moléculas con tasas de colisión inelásticas conocidas (H_2CO , HC_3N , CH_3CN y CH_3OH). Se han ejecutado un gran número de modelos LVG para un amplio rango de densidades de columna, densidades de H_2 ($n(\text{H}_2) = 10^3 - 10^9 \text{ cm}^{-3}$) y temperaturas del gas ($T_k = 10 - 1000 \text{ K}$). Cada modelo sintético obtenido se ha comparado con las líneas observadas con el objetivo de restringir el rango de condiciones físicas que reproducen las intensidades de línea observadas y los perfiles de línea hacia la posición observada. El modelo que mejor se ajusta a los datos observacionales se obtuvo al encontrar el valor mínimo del valor cuadrático medio (rms).

El análisis de excitación no-LTE sugiere que algunas COMs surgen de diferentes capas de la PDR (es decir, de distintas profundidades de la nube), pero no se pueden resolver espacialmente. En particular, H_2CO y CH_3CN sobreviven en el gas que está directamente expuesto a la radiación FUV ($T_k = 150 - 250 \text{ K}$ y $n(\text{H}_2) = (1 - 3) \times 10^6 \text{ cm}^{-3}$), mientras que CH_3OH sólo proviene de los *clumps* en el interior de la PDR que son más densos, fríos y están más protegidos de la radiación FUV ($T_k = 40 - 50 \text{ K}$ y $n(\text{H}_2) = 5 \times 10^7 \text{ cm}^{-3}$). El modelo que mejor ajusta las líneas de HC_3N tiene unas condiciones físicas intermedias entre el gas directamente expuesto a la radiación y los *clumps* más fríos y densos: $T_k = 70 - 90 \text{ K}$ y $n(\text{H}_2) > 1 \times 10^6 \text{ cm}^{-3}$. No obstante, se necesitan mapas de mayor resolución angular para resolver espacialmente las estructuras que producen la emisión molecular (Goicoechea et al. 2016). Este escenario coincide con la diferente distribución espacial de H_2CO y CH_3OH observada por Leurini et al. (2010), donde se muestra que el CH_3OH traza solo los *clumps* más densos y más fríos en el interior de la Barra, mientras que H_2CO traza también el gas extenso más caliente (*interclump*) expuesto directamente a la radiación FUV. El análisis de los mapas presentados en este trabajo muestra también que el H_2CO está presente en el gas caliente del *interclump* y que sobrevive cerca del borde PDR donde el flujo de radiación FUV es fuerte. Se ha inferido una presión del gas muy alta en el borde de la PDR ($P_{\text{th}}/k = n_{\text{H}} T_k \gtrsim 10^8 \text{ K cm}^{-3}$), consistente con trabajos anteriores (Goicoechea et al. 2011, 2016; Nagy et al. 2013).

■ Se han estudiado los efectos de excitación en condiciones de no-LTE LVG en los diagramas de rotación de moléculas simétricas (H_2CO) y asimétricas (CH_3CN). Para ello se han creado modelos LVG con MADEX variando la densidad de H_2 pero manteniendo constante la temperatura y la columna de densidad para cada molécula.

A densidades de gas muy altas, superiores a la densidad crítica de excitación colisional ($n \gg n_{\text{cr}}$), las colisiones inelásticas llevan a los niveles de población a condiciones cercanas al LTE ($T_{\text{rot}} \simeq T_k$). En un diagrama de rotación de una especie simétrica o asimétrica en condiciones de LTE, las escaleras con un mismo número cuántico K_a se unen en una sola línea recta con una pendiente igual a $-1/T_k$. Este diagrama de rotación se obtiene, por ejemplo, en *hot cores* (e.g. Bisschop et al. 2007) debido a las altas densidades del gas. A medida que la densidad del gas disminuye, la excitación se convierte en subtérmica ($T_{\text{rot}} \ll T_k$), y el diagrama de rotación empieza a mostrar escaleras de rotación separadas para cada conjunto de transiciones con el mismo número cuántico K_a . Para moléculas muy polares (y por tanto con una elevada densidad crítica) como CH_3CN y H_2CO , la excitación subtérmica ocurre a densidades relativamente altas. Por lo tanto, las densidades de columna y las temperaturas de rotación de los diagramas de rotación de moléculas simétricas y asimétricas sólo pueden obtenerse con exactitud si se calculan para cada escalera de rotación independientemente.

■ Se ha calculado un límite superior de la columna de densidad y abundancia para algunas moléculas orgánicas que no han sido detectadas en el barrido espectral, pero que sí están presentes en otras regiones de formación estelar: CH_3O , CH_3NC , CH_3CCH , CH_3OCH_3 , HCOOCH_3 , $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$, CH_2CHCN y $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CN}$. También se ha calculado un límite superior para HDCO, que si bien no se ha detectado en nuestro barrido espectral de la Barra de Orión en el frente de disociación, si ha sido detectado en un *clump* más frío, denso y protegido de la radiación FUV (Parise et al. 2009).

La no detección de HDCO en el borde iluminado de la Barra ($[\text{HDCO}]/[\text{H}_2\text{CO}] < 0.003$) ni en la PDR de Cabeza de Caballo (Guzmán et al. 2011) demuestra que la deutera-ción de H_2CO no es eficiente cuando la temperatura del gas es elevada. Sin embargo, sí se ha detectado HDCO (Parise et

al. 2009; $[\text{HDCO}]/[\text{H}_2\text{CO}] > 0.006$) en el *clump* número #3 de Lis & Schilke (2003), lo que sugiere que la deuteración es más eficiente en los *clumps* más fríos y protegidos de la radiación FUV que en el borde irradiado y caliente. Esto concuerda con los modelos químicos de Roueff et al. (2007) en los que la deuteración en fase gas es eficiente cuando el gas tiene temperaturas por debajo de $T_k \lesssim 70$ K.

■ Se han analizado mapas de la intensidad integrada de $\text{C}^{18}\text{O } J = 3 \rightarrow 2$ y $\text{H}_2\text{CO } J_{K_a, K_c} = 5_{1,5} \rightarrow 4_{1,4}$ con una resolución espectral de $8.5''$, con el objetivo de poner la posición observada del frente de disociación en el contexto de la emisión a gran escala de la Barra. Las observaciones muestran que el H_2CO está presente en el gas caliente del *interclump* y cerca del borde de la PDR donde el flujo de radiación FUV es alto.

■ Se ha investigado la posibilidad de que la emisión de las líneas moleculares más brillantes procedentes de la región de Orión BN/KL (localizada a una distancia de $\sim 2'$) estén contaminando nuestras observaciones a través de los lóbulos secundarios del haz del telescopio. Para ello se han comparado los espectros de H_2CS y CH_3OH observados en la Barra con los espectros de Orión BN/KL de Tercero et al. (2010). Esta comparación muestra una emisión molecular a $v_{\text{LSR}} \simeq 10.7 \text{ km s}^{-1}$ correspondiente con la velocidad de la Barra, pero también existe una contribución menos intensa a $v_{\text{LSR}} \simeq 8 \text{ km s}^{-1}$ posiblemente debida a la intensa emisión de Orión BN/KL y quizás por la componente extensa de la nube de Orión. Las líneas contaminantes no interfieren en nuestros análisis ya que ambas líneas no están solapadas.

■ Se han comparado las abundancias obtenidas en la Barra con varios ambientes interestelares con diferentes características físicas: Cabeza de Caballo (la PDR y un núcleo frío y denso protegido de la radiación), el *hot core* y el *ridge* compacto de Orión KL, el flujo de gas chocado en L1157, la protoestrella de baja masa (*hot corino*) IRAS 16293-2422 y la nube oscura Barnard 1–b.

Como era de esperar, las moléculas H_2CO y CH_3OH se encuentran en todas las fuentes estudiadas con abundancias de $N(\text{X})/N(\text{H}_2) > 10^{-10}$. En general, las abundancias de COMs (de CH_3OH en particular) son mucho más altas en Orión KL (*hot core* y *ridge* compacto) y en el gas chocado de L1157-B1. Esto se traduce en un bajo cociente de

abundancias $[\text{X}_{\text{COM}}]/[\text{CH}_3\text{OH}] \ll 1$ en estos entornos. Sin embargo, la PDR de Cabeza de Caballo muestra un cociente de abundancias $[\text{X}_{\text{COM}}]/[\text{CH}_3\text{OH}] > 1$ para $\text{X}_{\text{COM}} = \text{HCO}$, H_2CO , H_2CCO , CH_3CN y CH_3CCH .

Entre las especies estudiadas, sólo el radical HCO y el cofórmero *cis*- HCOOH (Cuadrado et al. 2016) son más abundantes en las PDRs, y sólo el H_2CO y el CH_3OH son más abundantes en la Barra que en la PDR de Cabeza de Caballo.

El *hot core* de Orión KL y el *ridge* compacto muestran una mayor abundancia de COMs. El proceso de formación que domina en estos entornos es la desorción térmica de los granos de polvo ($T_d > 100$ K) y la subsiguiente química en fase gas (e.g. Blake et al. 1987). El flujo de gas chocado de L1157 muestra las mayores abundancias de CH_3OH , H_2CO , H_2CS , HC_3N y CH_3CHO . Esto sugiere que los efectos combinados de la sublimación del manto de hielo, la pulverización de grano en los choques y la química en fase gas caliente dan lugar a una formación muy eficiente de COMs.

■ Se han realizado modelos químicos en fase gas con el código de PDRs Meudon para tratar de explicar las abundancias observadas e investigar la formación de HCO , H_2CO y CH_3OH .

Los modelos reproducen el aumento de la abundancia de HCO (formado mediante la reacción $\text{O} + \text{CH}_2 \rightarrow \text{HCO} + \text{H}$ en estos modelos) en el borde de la PDR de forma aproximada, pero subestima las abundancias observadas de H_2CO y CH_3OH . En estos modelos, la formación de H_2CO a $A_V \simeq 1.5 - 2.0$ mag se produce mediante la reacción $\text{O} + \text{CH}_3 \rightarrow \text{H}_2\text{CO} + \text{H}$.

■ Se ha calculado una relación de abundancias $\text{HCO}/\text{H}_2\text{CO}/\text{CH}_3\text{OH} \simeq 1/5/3$. Estas abundancias relativas son diferentes de las inferidas en *hot cores* y choques, ambientes dominados por la desorción térmica de las moléculas del manto de hielo de los granos de polvo o por la erosión del grano en los choques de alta velocidad.

En general, los modelos en fase gas tienen problemas para reproducir las abundancias observadas de H_2CO y especialmente de CH_3OH en las PDRs. Teniendo en cuenta las elevadas temperaturas del gas y del polvo en el borde de

la Barra (ya son, en su mayoría, granos sin manto de hielo), se sugieren los siguientes escenarios para la formación de COMs: (i) a través de reacciones en fase gas a alta temperatura que aún no han sido incluidas en los modelos de química actuales; (ii) por procesos químicos en la superficie del grano de polvo caliente; o (iii) la dinámica de la PDR hace que las COMs o sus especies precursoras, que se han formado en los mantos helados de los granos de polvo en el interior de la nube molecular, se desorban y lleguen hasta el borde de la PDR.

La presencia de COMs en el medio interestelar es más generalizada de lo que se esperaba inicialmente, incluyen-

do ambientes extremos como el gas en los choques de alta velocidad y el gas altamente iluminado con radiación FUV. La formación de las COMs refleja la complicada interacción entre la química en fase gas y la química en la superficie de los granos. Sin embargo, las rutas de formación no están completamente definidas y pueden incluso no ser las mismas en diferentes entornos. Se necesitan más experimentos de laboratorio para investigar los diferentes procesos químicos que se producen en la superficie de los granos, e investigar los productos y las tasas de desorción de mecanismos como la fotodesorción, sublimación, desorción química, etc. para poder entender la formación de COMs en los diferentes ambientes interestelares.

8.3. Cuadrado et al. 2017 (A&A)

Astronomy & Astrophysics manuscript no. COMs-OrionBar
May 26, 2017

© ESO 2017

Complex organic molecules in strongly UV-irradiated gas[★]

S. Cuadrado¹, J. R. Goicoechea¹, J. Cernicharo¹, A. Fuente², J. Pety^{3,4}, and B. Tercero¹

¹ Grupo de Astrofísica Molecular. Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid (CSIC), Sor Juana Inés de la Cruz 3, 28049 Cantoblanco, Madrid, Spain. e-mail: s.cuadrado@icmm.csic.es

² Observatorio Astronómico Nacional, Apdo. 112, 28803 Alcalá de Henares, Madrid, Spain

³ Institut de Radioastronomie Millimétrique (IRAM), 300 rue de la Piscine, F-38406 Saint Martin d'Hères, France

⁴ LERMA, Observatoire de Paris, CNRS UMR 8112, École Normale Supérieure, PSL research university, 24 rue Lhomond, 75231, Paris Cedex 05, France

Received 18 January 2017 / Accepted 12 May 2017

ABSTRACT

We investigate the presence of complex organic molecules (COMs) in strongly UV-irradiated interstellar molecular gas. We have carried out a complete millimetre (mm) line survey using the IRAM 30 m telescope towards the edge of the Orion Bar photodissociation region (PDR), close to the H₂ dissociation front, a position irradiated by a very intense far-UV (FUV) radiation field. These observations have been complemented with 8.5'' resolution maps of the H₂CO $J_{K_a,K_c} = 5_{1,5} \rightarrow 4_{1,4}$ and C¹⁸O $J = 3 \rightarrow 2$ emission at 0.9 mm. Despite being a harsh environment, we detect more than 250 lines from COMs and related precursors: H₂CO, CH₃OH, HCO, H₂CCO, CH₃CHO, H₂CS, HCOOH, CH₃CN, CH₂NH, HNCO, H₂¹³CO, and HC₃N (in decreasing order of abundance). For each species, the large number of detected lines allowed us to accurately constrain their rotational temperatures (T_{rot}) and column densities (N). Owing to subthermal excitation and intricate spectroscopy of some COMs (symmetric- and asymmetric-top molecules such as CH₃CN and H₂CO, respectively), a correct determination of N and T_{rot} requires building rotational population diagrams of their rotational ladders separately. The inferred column densities are in the 10^{11} – 10^{13} cm^{−2} range. We also provide accurate upper limit abundances for chemically related molecules that might have been expected, but are not conclusively detected at the edge of the PDR (HDCO, CH₃O, CH₃NC, CH₃CCH, CH₃OCH₃, HCOOCH₃, CH₃CH₂OH, CH₃CH₂CN, and CH₂CHCN). A non-thermodynamic equilibrium excitation analysis for molecules with known collisional rate coefficients suggests that some COMs arise from different PDR layers but we cannot resolve them spatially. In particular, H₂CO and CH₃CN survive in the extended gas directly exposed to the strong FUV flux ($T_k = 150$ – 250 K and $T_d \gtrsim 60$ K), whereas CH₃OH only arises from denser and cooler gas clumps in the more shielded PDR interior ($T_k = 40$ – 50 K). The non-detection of HDCO towards the PDR edge is consistent with the minor role of pure gas-phase deuteration at very high temperatures. We find a HCO/H₂CO/CH₃OH $\approx 1/5/3$ abundance ratio. These ratios are different from those inferred in hot cores and shocks. Taking into account the elevated gas and dust temperatures at the edge of the Bar (mostly mantle-free grains), we suggest the following scenarios for the formation of COMs: (i) hot gas-phase reactions not included in current models; (ii) warm grain-surface chemistry; or (iii) the PDR dynamics is such that COMs or precursors formed in cold icy grains deeper inside the molecular cloud desorb and advect into the PDR.

Key words. astrochemistry - surveys - ISM: photon-dominated region (PDR) - ISM: molecules - ISM: abundances.

1. Introduction

Almost 200 molecules have been detected in the interstellar medium (ISM) and circumstellar shells. A very large fraction of them are complex organic molecules (COMs). COMs are traditionally defined as carbon-based molecular species with more than six atoms in their structure (Herbst & van Dishoeck 2009; Caselli & Ceccarelli 2012). To date, the largest organic molecules detected in the ISM (excluding PAHs and fullerenes) are propyl cyanide (C₃H₇CN; Belloche et al. 2009, 2014) and benzene (c-C₆H₆; Cernicharo et al. 2001).

COMs have been detected in the ISM since the 1970s (e.g. CH₃CHO, Gottlieb 1973; or HCOOCH₃, Brown et al. 1975). Most of the detections have been reported towards hot cores, that is, dense gas surrounding high-mass protostars in massive star-forming regions such as Sgr B2 and Orion KL (e.g. Bisschop et al. 2007; Ziurys & McGonagle 1993; Tercero et al. 2013, 2015; Ikeda et al. 2001), and towards hot corinos, that is,

the low-mass analogs of hot cores such as IRAS 16293-2422 (Cazaux et al. 2003) and NGC 1333 IRAS 4A (Bottinelli et al. 2004). The high degree of chemical complexity (e.g. C₂H₅CN, CH₃CCH, HCOOCH₃, CH₃OCH₃...) found in these protostellar sources is thought to result from thermal desorption of the ice mantles coating dust grains. Herbst & van Dishoeck (2009) have reviewed the subject. They classify the observed COMs towards protostars in three different generations depending on the time they are produced. The zeroth-generation species, such as H₂CO and CH₃OH, are formed through grain-surface reactions in a previous cold interstellar phase in which icy mantles built up around granular cores of carbon and silicate grains. The first-generation species, such as HCOOCH₃, are formed during the passive warm-up of the inner envelope of the protostar. During this phase, zeroth-generation species are photodissociated producing radicals such as HCO and CH₃O, which can associate through surface reactions to form larger molecules. Finally, the second-generation species are formed once the core has become a hot core or hot corino. The dust temperature at this stage is high enough ($T_d \gtrsim 100$ K) to sublimate the mantles completely,

[★] Based on observations obtained with the IRAM 30m telescope. IRAM is supported by INSU/CNRS (France), MPG (Germany), and IGN (Spain).

and new molecules are formed through warm gas-phase reactions (ion molecule and endothermic neutral-neutral reactions).

When protostellar outflows impact the ambient envelope material, grains can be eroded, and because of the high temperatures reached in shocks, icy mantles can sublimate. In sufficiently high-velocity shocks, ices can also be sputtered and directly injected into the gas phase (e.g. $v_s > 20 - 25 \text{ km s}^{-1}$ for water ice, Draine et al. 1983). Several observations of the L1157 outflow have revealed the existence of H_2CO , H_2CS , CH_3OH , HC_3N , HNCO , NH_2CHO , and CH_3CHO in shocked gas (Bachiller & Pérez Gutiérrez 1997; Mendoza et al. 2014; Codella et al. 2015). In addition, Requena-Torres et al. (2006) have shown that the galactic centre contains dense clouds that are rich in CH_3OH , HCOOCH_3 , and CH_3OCH_3 . Widespread shocks have been invoked to explain their abundance and extended spatial distribution. The relative importance of the gas-phase reactions immediately after ice mantle sublimation compared to a formation of COMs on the grain surfaces is however far from being understood.

Recent observations towards UV-shielded cold cores (e.g. TMC 1, L1689B, or Barnard 1-b) have revealed molecules once considered to be present only in hot molecular cores (e.g. Remijan et al. 2006; Bacmann et al. 2012; Cernicharo et al. 2012). In these cold environments, COMs are thought to form on the surface of grains and to be released through non-thermal desorption processes, chemical desorption, direct desorption by cosmic ray impacts, or secondary photon induced processes (Cernicharo et al. 2012). Finally, a number of organic species have been identified in circumstellar envelopes around evolved stars (e.g. IRC+10216, Cernicharo et al. 2000), towards extragalactic sources (e.g. Meier & Turner 2005, 2012; Aladro et al. 2011), meteorites (e.g. Cronin & Chang 1993), and comets (e.g. Bockelée-Morvan et al. 2004).

Studies of environments permeated by stellar far-UV photons (FUV , $6.0 \text{ eV} < h\nu < 13.6 \text{ eV}$) are more scarce. Guzmán et al. (2014) and Gratier et al. (2013) presented the unexpected detection of HCOOH , CH_2CO , CH_3CN , CH_3OH , CH_3CHO , and CH_3CCH in the Horsehead photodissociation region (PDR; a relatively low-FUV-flux dense PDR, $\chi \approx 60$ times the mean interstellar field in Draine units), finding enhanced abundances compared to a nearby cold and dense core shielded from external FUV radiation. Guzmán et al. (2014) proposed that owing to the cold grain temperatures, ice-mantle photodesorption processes dominate the formation of COMs in the Horsehead. In lower-density translucent clouds ($\chi \approx 1$), only H_2CO has been unambiguously detected (Liszt et al. 2006). These observations might suggest that, in FUV-irradiated environments, the presence of COMs diminishes as the χ/n_{H} ratio increases. Thus, COMs might not be present in strongly FUV-irradiated gas.

In this work we test the above hypothesis and investigate the presence and abundances of COMs at the high FUV-illuminated edge of the Orion Bar, with an impinging radiation field of a few 10^4 times the mean interstellar field (Marconi et al. 1998). Because of its proximity ($414 \pm 7 \text{ pc}$, Menten et al. 2007) and nearly edge-on orientation, the Orion Bar provides an excellent template to determine the chemical content and also to investigate the structure and dynamics of strongly FUV-irradiated molecular gas (e.g. Tielens et al. 1993; Hogerheijde et al. 1995; Cuadrado et al. 2015, 2016; Goicoechea et al. 2016).

Multi-wavelength observations towards different positions of the Orion Bar have been historically used in the development of PDR models (e.g. Tielens & Hollenbach 1985a,b) and today they are still used as a template to understand the unresolved emission from sources as different as the nuclei of distant star-

burst galaxies (e.g. Fuente et al. 2008) or the illuminated surfaces of protoplanetary disks (e.g. Agúndez et al. 2008). The transition from ionised to neutral gas in the Orion Bar has been extensively mapped, generally at low angular resolution, in various atomic and molecular tracers (see e.g. Tielens et al. 1993; Hogerheijde et al. 1995; van der Werf et al. 1996; Walmsley et al. 2000; Leurini et al. 2010; Ossenkopf et al. 2013). The detailed analysis of these observations suggested an inhomogeneous density distribution. The most commonly accepted scenario is that an extended gas component, with mean gas densities of $10^4 - 10^5 \text{ cm}^{-3}$, causes the chemical stratification seen perpendicular to the dissociation front as the FUV field is attenuated (Hogerheijde et al. 1995; Jansen et al. 1995; Simon et al. 1997; van der Wiel et al. 2009; Habart et al. 2010; van der Tak et al. 2013). In addition, another component of clumpy material with higher densities ($\gtrsim 10^6 \text{ cm}^{-3}$) and more shielded from FUV radiation is embedded in the interclump gas (Burton et al. 1990; Parmar et al. 1991; Stoerzer et al. 1995; Young Owl et al. 2000; Lis & Schilke 2003; Batrla & Wilson 2003; Andree-Labsch et al. 2017). Previous observations of H_2CO and CH_3OH in the Orion Bar have shown that the two molecules trace these two different environments: CH_3OH , the denser and cooler clumps seen deeper inside the Bar, and H_2CO , the warmer interclump medium directly exposed to the strong FUV-field (Leurini et al. 2006, 2010).

We have performed a complete millimetre line survey using the IRAM 30 m telescope towards the edge of Orion Bar, a high FUV-illuminated position close to what Stoerzer et al. (1995) call the “ CO^+ peak”, near the H_2 dissociation front (see Fig. 1). This position shows a distinctive chemistry that can only be understood due to the presence of a strong flux of FUV photons (e.g. compared to that in the more shielded clumps deeper inside the Bar): enhanced abundances of simple reactive ions (e.g. CH^+ , CO^+ , and HOC^+) and small hydrocarbon ions (e.g. $\text{I-C}_3\text{H}^+$) that are only abundant in the presence of C^+ ; vibrationally excited H_2 ; and high gas temperatures (e.g. Nagy et al. 2013; Guzmán et al. 2015; Cuadrado et al. 2015). Indeed, high-angular resolution ALMA-ACA images do show that reactive ions such as SH^+ or HOC^+ do not emit from the more shielded clumps (Goicoechea et al. 2017). Therefore, their chemistry is different to that of the PDR edge observed in this work. Our survey covers $\sim 220 \text{ GHz}$ of bandwidth, between 80 GHz and 360 GHz . These observations have been complemented with several $8.5''$ resolution maps of different molecules at 0.9 mm to put our line survey position in the context of the Bar large-scale emission. In this paper we focus on the detection of rotational lines from COMs and related precursors.

The paper is organised as follows. In Sect. 2 we describe the line survey and the mapping observations. In Sect. 3 we report the observational features of the detected organic molecules, while in Sect. 4 we present the C^{18}O and H_2CO integrated line intensity maps at 0.9 mm . The data analysis is explained in Sect. 5. In Sect. 6 we discuss the results, and finally in Sect. 7 we summarise the main conclusions.

2. Observations and data reduction

2.1. Line survey

We performed a complete millimetre line survey towards the edge of Orion Bar using the IRAM 30 m telescope. The target position is at $\alpha_{2000} = 05^{\text{h}} 35^{\text{m}} 20.8^{\text{s}}$, $\delta_{2000} = -05^{\circ} 25' 17.0''$, close to the dissociation front. This

S. Cuadrado et al.: Complex organic molecules in strongly UV-irradiated gas

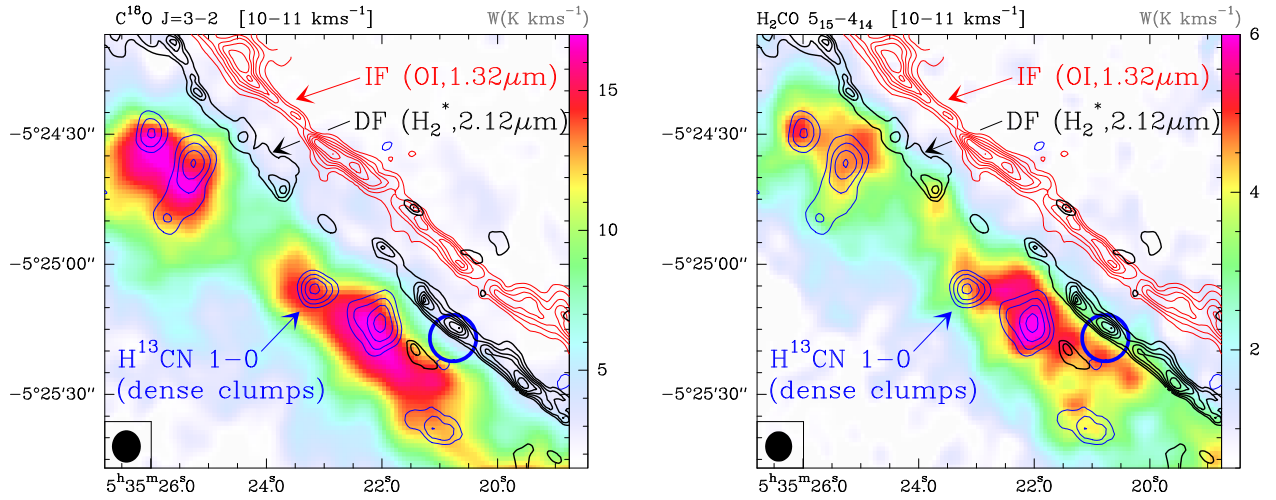


Fig. 1. $\text{C}^{18}\text{O } J=3 \rightarrow 2$ (left panel) and $\text{H}_2\text{CO } J_{K_a, K_c} = 5_{1,5} \rightarrow 4_{1,4}$ (right panel) line integrated intensity maps (W in K km s^{-1}) in the $10 - 11 \text{ km s}^{-1}$ velocity interval observed with the IRAM 30 m telescope at $\sim 329 \text{ GHz}$ and $\sim 351 \text{ GHz}$, respectively (colour scale). Black contours are the $\text{H}_2 v=1 \rightarrow 0 \text{ S}(1)$ emission delineating the H_2 dissociation front (DF, Walmsley et al. 2000). The red contours represent the $\text{OI } 1.32 \mu\text{m}$ emission delineating the ionisation front (IF) that separates the H II region and the neutral cloud. The blue contours represent the $\text{H}^{13}\text{CN } J=1 \rightarrow 0$ emission tracing dense molecular clumps inside the Bar (Lis & Schilke 2003). The target position of the Orion Bar survey, close to the DF, is indicated with a blue circle. The IRAM 30 m beam at 1 mm is plotted in the bottom left corner (black circle).

Table 1. Observed frequency ranges and telescope parameters.

Rec. ^a	Backend	Freq. ^b [GHz]	$\delta\nu^c$ [km s^{-1}]	η_{MB}^d	HPBW ^e [arcsec]
E0	FFTS	80–117	0.75–0.51	0.87–0.82	31–21
E1	WILMA	128–176	4.7–3.4	0.80–0.74	19–14
E2	FFTS	202–275	0.30–0.22	0.70–0.56	12–9
E3	FFTS	275–305	0.22–0.20	0.56–0.50	9–8
	FFTS	328–359	0.18–0.17	0.46–0.40	8–7

Notes. ^(a) Emir receiver. ^(b) Observed frequency range. ^(c) Spectral resolution in velocity units ($\delta\nu$) in the observed frequency ranges. ^(d) Antenna efficiencies. ^(e) The half power beam width can be well fitted by $\text{HPBW}[\text{arcsec}] \approx 2460/\text{Frequency}[\text{GHz}]$.

position is at $(\Delta\alpha, \Delta\delta) = (3'', -3'')$ from the “ CO^+ peak” of Storz et al. (1995).

Our observations cover a total of 217 GHz along 3, 2, 1, and 0.9 mm bands of the EMIR receivers using the WILMA (2 MHz spectral resolution) and FTS (200 kHz spectral resolution) backends. The observing procedure was position switching (PSW) with the reference position located at an offset $(-600'', 0'')$ to avoid the extended molecular emission from the Orion Molecular Cloud (OMC-1). The antenna temperature, T_A^* , was converted to the main beam temperature, T_{MB} , through the $T_{\text{MB}} = T_A^*/\eta_{\text{MB}}$ relation, where η_{MB} is the antenna efficiency. All intensities in tables and figures are in main beam temperature. A local standard of rest (LSR) of 10.7 km s^{-1} has been used in the line survey target position in the Orion Bar dissociation front. Table 1 shows an overview of the frequency ranges observed with each backend, the spectral resolution in velocity units ($\delta\nu$) in the observed frequency ranges, as well as the variation in the telescope efficiencies, η_{MB} , and the half power beam width (HPBW) across the covered frequency range.

In Appendix A we study the possible contamination of bright molecular line emission from the Orion BN/KL region (located at a distance of $\sim 2'$) through the beam side lobes (several arcmin, see Greve et al. 1998). Although the contribution to the detected power ranges from $\sim 12\%$ (3 mm) to $\sim 30\%$ (0.8 mm), most of the emission from the hot core region arises at different velocities ($\sim 8 \text{ km s}^{-1}$) than those of the Orion Bar ($\sim 10 - 11 \text{ km s}^{-1}$) and thus can be easily separated.

Data reduction and spectral analysis were done using the CLASS software of the GILDAS package¹ developed by IRAM. Weighted spectra were averaged and calibrated, and a polynomial baseline of low order (typically second or third order) was subtracted from each $\sim 200 \text{ MHz}$ wide spectrum. Finally, Gaussian profiles were fitted to all the detected lines (Appendix B). The rms noise of our observations obtained after integration during $\sim 4 \text{ h}$ ranges between 4 mK and 20 mK per resolution channel.

2.2. Maps

The 0.9 mm line emission from different molecules was mapped with the IRAM 30 m telescope in January 2014 under excellent winter conditions ($< 1 \text{ mm}$ of precipitable water vapour). The E3 receiver and the FTS backend at 200 kHz spectral resolution were used. On-the-fly (OTF) scans were obtained along and perpendicular to the Bar over a $170'' \times 170''$ region, with an OFF position at $(-600'', 0'')$ relative to the map centre at $\alpha_{2000} = 05^{\text{h}} 35^{\text{m}} 20.1^{\text{s}}$, $\delta_{2000} = -05^{\circ} 25' 07.0''$, which is slightly different from that of the line survey (see above). The HPBW at this frequency is $\sim 7''$. Data processing consisted in a linear baseline subtraction in each observed spectra. The resulting spectra were gridded to a data cube through convolution with a Gaussian kernel providing a final resolution of $8.5''$. The total integration time was approximately 6 h, and the achieved rms noise is $\sim 1 \text{ K}$ per $\sim 0.2 \text{ km s}^{-1}$ channel. Figure 1 shows the $\text{C}^{18}\text{O } J=3 \rightarrow 2$ and $\text{H}_2\text{CO } J_{K_a, K_c} = 5_{1,5} \rightarrow 4_{1,4}$ integrated line intensity maps in

¹ <http://www.iram.fr/IRAMFR/GILDAS/>

Table 2. Dipole moments (μ), number of detected lines of complex organic molecules and related organic precursors, and their corresponding Figure and Table numbers.

Molecule	No. of lines	μ [Debyes]	Fig.	Table
HCO	16	$\mu_a=1.363$ $\mu_b=0.700^a$	2	B.1
H ₂ CO	15	$\mu_a=2.332^b$	3	B.2
H ₂ ¹³ CO	8	$\mu_a=2.332^b$	4	B.3
H ₂ CS	26	$\mu_a=1.649^b$	5	B.4
HNCO	6	$\mu_a=1.602$ $\mu_b=1.350^c$	6	B.5
CH ₂ NH	6	$\mu_a=1.340$ $\mu_b=1.446^d$	7	B.6
H ₂ CCO	30	$\mu_a=1.422^b$	8	B.7
HC ₃ N	11	$\mu_a=3.732^e$	9	B.8
CH ₃ CN	44	$\mu_a=3.922^f$	11	B.9
CH ₃ OH	55	$\mu_a=0.896$ $\mu_b=1.412^g$	12	B.10
CH ₃ CHO	36	$\mu_a=2.423$ $\mu_b=1.260^h$	13	B.11

References. ^(a) Blake et al. (1984); ^(b) Fabricant et al. (1977); ^(c) Hocking et al. (1975); ^(d) Allegrini et al. (1979); ^(e) DeLeon & Muentner (1985); ^(f) Gadhi et al. (1995); ^(g) Sastry et al. (1981); ^(h) Kleiner et al. (1996).

the range $v_{\text{LSR}} = 10 - 11 \text{ km s}^{-1}$ in which the Orion Bar shows prominent emission. We note that van der Wiel et al. (2009) also presented a smaller H₂CO $J_{K_a,K_c} = 5_{1,5} \rightarrow 4_{1,4}$ map at lower angular resolution (a factor of ~ 2).

3. Results: complex organic molecule detections

We have identified more than 250 lines from COMs and related organic precursors. The detected lines are attributed to ten different molecules with up to seven atoms: HCO, HNCO, H₂CO, H₂CS, CH₂NH, H₂CCO, HC₃N, CH₃OH, CH₃CN, and CH₃CHO. We also detect several lines of the isotopologue H₂¹³CO. We note that among the organic molecules with up to seven atoms, we also identified several lines of formic acid, trans- and cis-HCOOH, in the Orion Bar PDR. Cuadrado et al. (2016) have recently reported the first detection of the cis conformer of HCOOH in the interstellar medium as well as a detailed analysis of the detected lines of both HCOOH conformers in the 3 mm spectral band. Line profiles peak at $v_{\text{LSR}} = 10 - 11 \text{ km s}^{-1}$, the velocity of the Bar, thus confirming their PDR origin. The detected organic molecules and their dipole moments are listed in Table 2.

Previous studies of the Orion Bar have already reported the presence of HCO, H₂CO, and CH₃OH in several positions close to the “CO⁺ peak”: (i) Schilke et al. (2001) detected one hyperfine component of HCO $N = 1 \rightarrow 0$ using the IRAM 30 m telescope; (ii) Hogerheijde et al. (1995) detected nine lines of H₂CO and three lines of CH₃OH in several positions along the Bar using the JCMT, IRAM 30 m, and CSO telescopes; (iii) Nagy et al. (2017) detected ten submm H₂CO lines with Herschel/HIFI. In addition, H₂CO, H₂¹³CO, HDCO, H₂CS, and CH₃OH have been detected towards the colder, denser, and more FUV-shielded clumps: (iv) Leurini et al. (2006) detected seven lines of H₂CO, four lines of H₂CS, and ten lines of CH₃OH using APEX between 279 GHz and 361.5 GHz towards clump #1 of Lis & Schilke (2003); (v) Parise et al. (2009) also detected two isotopologues, one line of H₂¹³CO and one line of HDCO,

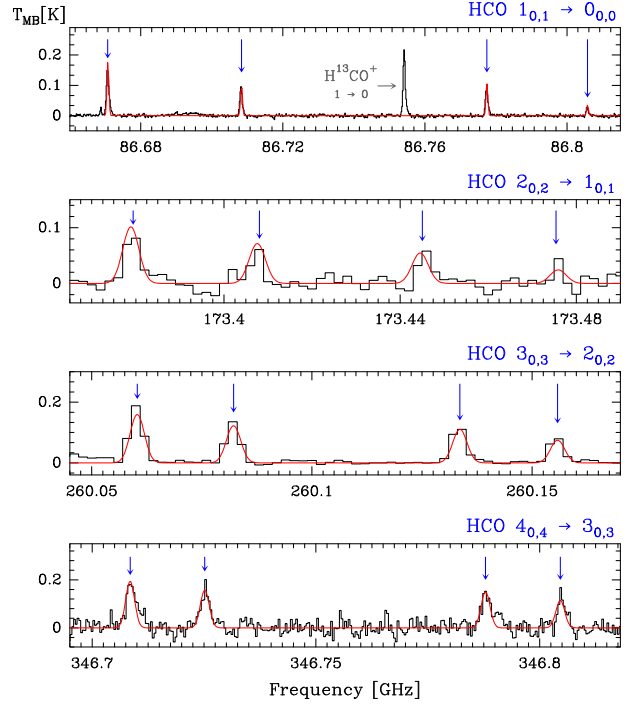


Fig. 2. Detected HCO hyperfine structure (HFS) lines of the $N = 1 \rightarrow 0$, $2 \rightarrow 1$, $3 \rightarrow 2$, and $4 \rightarrow 3$ rotational transitions (black histogram spectra). A single excitation temperature model is shown overlaid in red (see Sect. 5.4). HFS lines are indicated by the blue arrows. The other spectral features appearing in the selected windows are labelled with their corresponding identification.

towards clump #3 of Lis & Schilke (2003) using the IRAM 30 m telescope. To our knowledge, our work presents the first detection of CH₂NH, H₂CCO, HC₃N, CH₃CN, and CH₃CHO in the Orion Bar PDR.

Line assignment was carried out using J. Cernicharo’s spectral catalogue (MADEX, Cernicharo 2012), and the JPL (Pickett et al. 1998)² and CDMS (Müller et al. 2001, 2005)³ public databases. Although some lines have peak intensities lower than 3σ noise level, we included them in our results as tentative detections because other transitions from the same molecule are well detected in this survey, and these 3σ limits are in agreement with our excitation models. Given their intricate spectroscopy, below we summarise the main spectroscopic information of the detected species.

3.1. Formyl radical: HCO

The formyl radical, HCO, is a light asymmetric rotor with one unpaired electron and one non-zero nuclear spin. The quantum numbers designating the energy levels are N , J , and F . Spin doubling ($J = N + S$) is produced by the coupling between the rotational angular momentum, N , and the unpaired electron spin, S , while the hyperfine structure ($F = J + I$) is due to the coupling of the angular momentum, J , and the spin of the hydrogen nucleus, I . Each rotational level N_{K_a,K_c} is split into a doublet by the spin-rotation interaction, the levels of which are further split into doublets by magnetic hyperfine interactions, with the final

² <http://spec.jpl.nasa.gov/>

³ <http://www.astro.uni-koeln.de/cdms/>

S. Cuadrado et al.: Complex organic molecules in strongly UV-irradiated gas

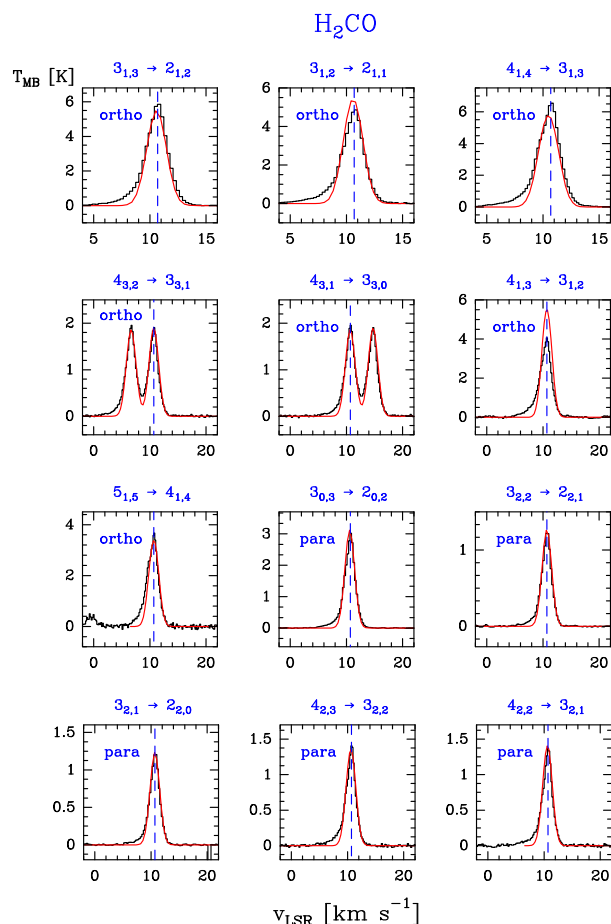


Fig. 3. Example of ortho- and para- H_2CO lines (black histogram spectra). A non-LTE LVG model ($T_k \approx 200$ K, $n(\text{H}_2) \approx 1 \times 10^6 \text{ cm}^{-3}$, $N(\text{o-H}_2\text{CO}) = 4.0 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$, and $N(\text{p-H}_2\text{CO}) = 1.8 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$) is shown overlaid in red (see Sect. 5.2). The dashed lines indicate the LSR velocity (10.7 km s^{-1}) of the Orion Bar PDR.

energy levels labelled by the quantum number $F = J \pm 1/2$ (e.g. Bowater et al. 1971; Saito 1972; Austin et al. 1974; Blake et al. 1984). a -type ($\Delta K_a = 0, \pm 2, \dots$) and b -type ($\Delta K_a = \pm 1, \pm 3, \dots$) transitions are allowed, with a stronger dipole moment for the a -type transitions (see Table 2).

We identified a total of 16 lines of HCO. They consist of four sets of rotational transitions corresponding to the hyperfine splitting of the $N = 1 \rightarrow 0$ to $4 \rightarrow 3$ transitions. All transitions observed here are a -type. The quantum numbers of the detected HCO transitions, their spectroscopic parameters, and the results from fitting the line profiles with Gaussians are listed in Table B.1. In Fig. 2 we present the spectra of the $N = 1 \rightarrow 0$ to $4 \rightarrow 3$ rotational lines.

3.2. Formaldehyde: H_2CO

Formaldehyde, H_2CO , was the first polyatomic organic molecule found in the ISM (Snyder et al. 1969). It is a slightly asymmetric prolate rotor molecule with K -type doublets and an ortho-para symmetry because of the two indiscernible off-axis hydrogen atoms. The ortho states are those with K_a odd, and the para states with K_a even. The nuclear spin weights are 3 and 1 for

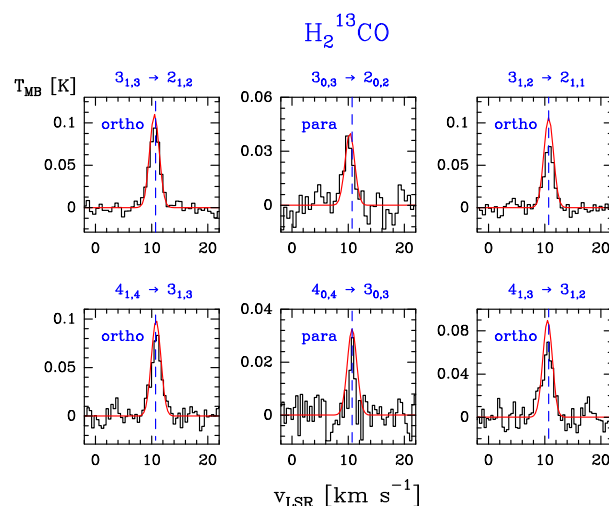


Fig. 4. Example of ortho- and para- H_2^{13}CO lines (black histogram spectra). A non-LTE LVG model ($T_k \approx 200$ K, $n(\text{H}_2) \approx 1 \times 10^6 \text{ cm}^{-3}$, $N(\text{o-H}_2^{13}\text{CO}) = 7.3 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, and $N(\text{p-H}_2^{13}\text{CO}) = 2.3 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$) is shown overlaid in red (see Sect. 5.2).

$\text{o-H}_2\text{CO}$ and $\text{p-H}_2\text{CO}$, respectively. The K -type doublets are the result of the slight asymmetry in the H_2CO produced by the light H atoms. There are no line doublets in the $K_a = 0$ para state (e.g. Bocquet et al. 1996; Brünken et al. 2003; Eliet et al. 2012).

We detected nine lines of the ortho species (in the $K_a = 1$ and 3 ladders) with $E_u/k \leq 125.8$ K, and six lines for the para species (in the $K_a = 0$ and 2 ladders) with $E_u/k \leq 82.1$ K. Line profiles are shown in Fig. 3. Table B.2 gives the observed line parameters.

We also detected eight lines of H_2^{13}CO , consisting of six lines of ortho species and two lines of the para species, in the $K_a = 0$ and 1 ladders, respectively ($E_u/k \leq 34.0$ K). Line profiles are shown in Fig. 4. Table B.3 gives the observed line parameters. No lines of deuterated formaldehyde were detected.

3.3. Thioformaldehyde: H_2CS

Thioformaldehyde, H_2CS , has a formaldehyde-like structure. It is a slightly asymmetric prolate rotor, with only a -type transitions and ortho-para symmetry (e.g. Johnson et al. 1971; Beers et al. 1972; Maeda et al. 2008).

We detected 15 lines of ortho species (in the $K_a = 1$ and 3 ladders) with $E_u/k \leq 149.8$ K, and 11 lines of para species (in the $K_a = 0$ and 2 ladders) with $E_u/k \leq 112.0$ K. Figure 5 shows a selection of ortho and para detected lines. Table B.4 gives the observed line parameters.

3.4. Isocyanic acid: HNCO

Isocyanic acid, H-N=C=O , is the simplest molecule containing carbon, hydrogen, oxygen, and nitrogen. It is a slightly asymmetric prolate rotor with a - and b -type transitions. Its rotational levels are designated as J_{K_a, K_c} (e.g. Kukolich et al. 1971; Hocking et al. 1975; Lapinov et al. 2007).

We detect six a -type transitions inside the $K_a = 0$ rotational ladder ($E_u/k \leq 96.0$ K). The observed lines do not show evidence for hyperfine splittings. Line profiles are shown in Fig. 6. Table B.5 gives the observed line parameters.

S. Cuadrado et al.: Complex organic molecules in strongly UV-irradiated gas

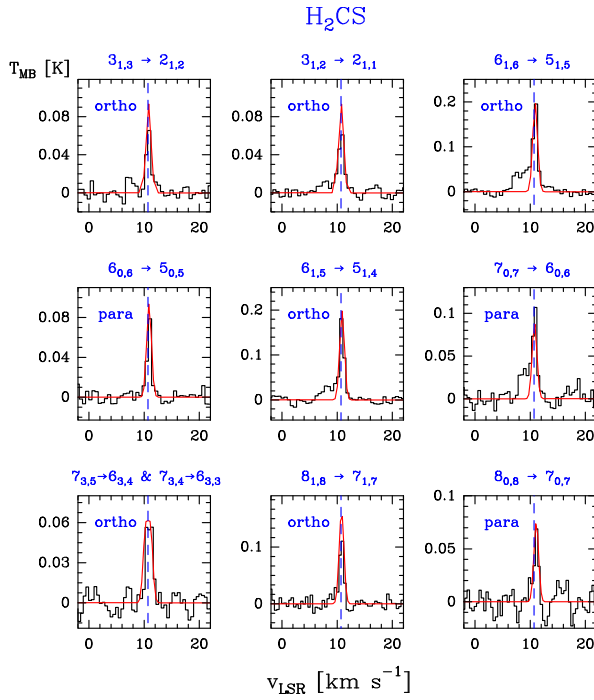


Fig. 5. Example of ortho- and para- H_2CS lines (black histogram spectra). Single excitation temperature models are shown overlaid in red (see Sect. 5.4).

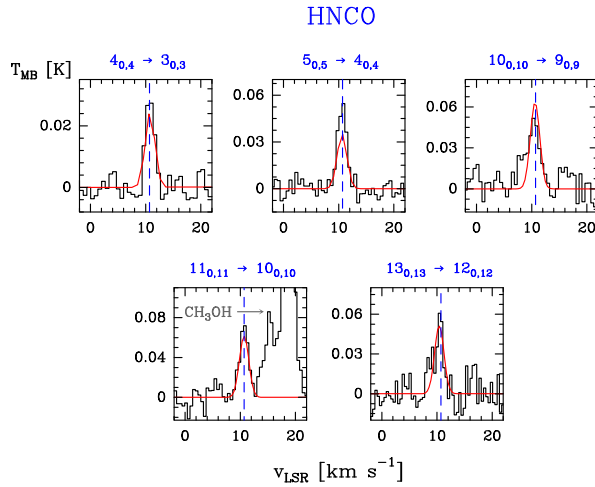


Fig. 6. Example of HNC detected lines (black histogram spectra). A single excitation temperature model is shown overlaid in red (see Sect. 5.4).

3.5. Methanimine: CH_2NH

Methanimine is the simplest molecule containing a carbon-nitrogen double bond ($\text{H}_2\text{C}=\text{NH}$). It is a planar molecule and a nearly prolate asymmetric rotor with components of the electric dipole moment along both the a and b molecular axes (e.g. Kirchhoff et al. 1973; Dore et al. 2010, 2012).

We detected six lines of CH_2NH consisting of (i) three a -type transitions (in the $K_a = 0$ and 1 ladders) and (ii) three b -type transitions, with $E_u/k \leq 64.1$ K. The observed lines do not show

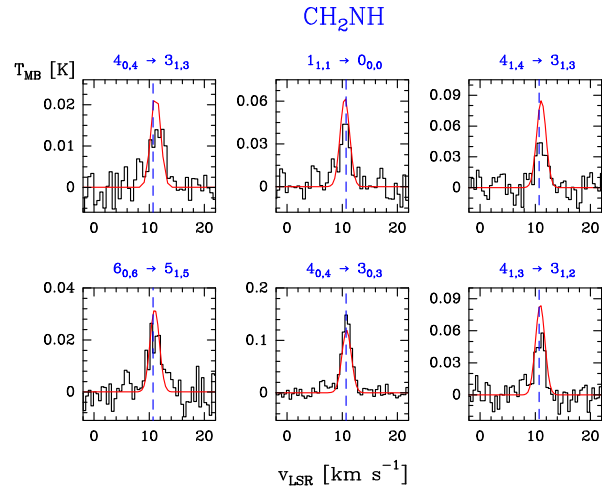


Fig. 7. CH_2NH detected lines (black histogram spectra). A single excitation temperature model is shown overlaid in red (see Sect. 5.4).

evidence for hyperfine splittings. The line profiles are shown in Fig. 7. Table B.6 gives the observed line parameters.

3.6. Ketene: H_2CCO

Ketene, $\text{H}_2\text{C}=\text{C}=\text{O}$, is a slightly asymmetric prolate rotor with only a -type transitions and ortho-para symmetry (e.g. Johnson & Strandberg 1952; Fabricant et al. 1977; Brown et al. 1990; Johns et al. 1992). We detected 20 lines of ortho species (in the $K_a = 1$ and 3 ladders) with $E_u/k \leq 205.2$ K, and ten lines for the para species (in the $K_a = 0$ and 2 ladders) with $E_u/k \leq 154$ K. Examples of the line profiles of ortho and para lines are shown in Fig. 8. Table B.7 gives the observed line parameters.

3.7. Cyanoacetylene: HC_3N

Cyanoacetylene, $\text{H}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{C}\equiv\text{N}$, is a linear molecule with a large dipole moment of $\mu_a = 3.732$ D (DeLeon & Muentner 1985). It is the simplest example of cyanopolynes, HC_nN (with $n = 3, 5, 7, \dots$; see e.g. Turner 1971; Avery et al. 1976; Cernicharo et al. 1986). The rotational transitions show hyperfine splittings owing to the interaction of the electric-quadrupole moment of the nitrogen nuclear spin with the electronic-charge distribution (e.g. de Zafra 1971; Mbosei et al. 2000; Chen et al. 1991; Yamada et al. 1995; Thorwirth et al. 2000). This hyperfine splitting is only fully resolved in the lowest rotational transitions (e.g. Turner 1971; Dickinson 1972), therefore, HC_3N is described here by a simple rotational spectrum, with $J+1 \rightarrow J$ transitions.

We detected 11 lines of HC_3N , from $J = 9 \rightarrow 8$ to $24 \rightarrow 23$, with $E_u/k \leq 131.0$ K. Figure 9 shows a selection of detected lines and Table B.8 gives the observed line parameters.

3.8. Methyl cyanide: CH_3CN

Methyl cyanide, CH_3CN , is a strongly prolate symmetric rotor, therefore, the permitted radiative transitions are all $\Delta K = 0$. The internal rotation of the methyl group gives rise to two non-interacting torsional substates, denoted A and E. The A state levels are described by $K = 3n$, and those of E state by $K = 3n \pm 1$, with $n \geq 0$ (e.g. Kukolich et al. 1973; Kukolich 1982; Boucher

S. Cuadrado et al.: Complex organic molecules in strongly UV-irradiated gas

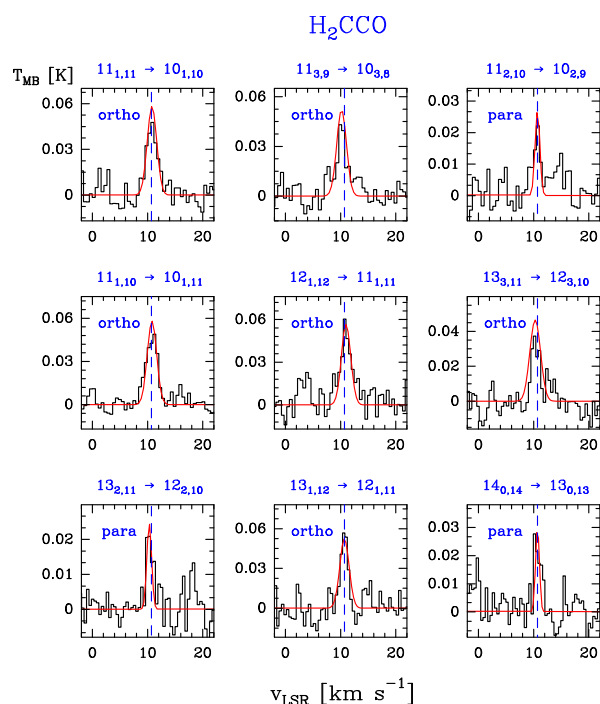


Fig. 8. Example of ortho- and para- H_2CCO lines (black histogram spectra). Single excitation temperature models are shown overlaid in red (see Sect. 5.4).

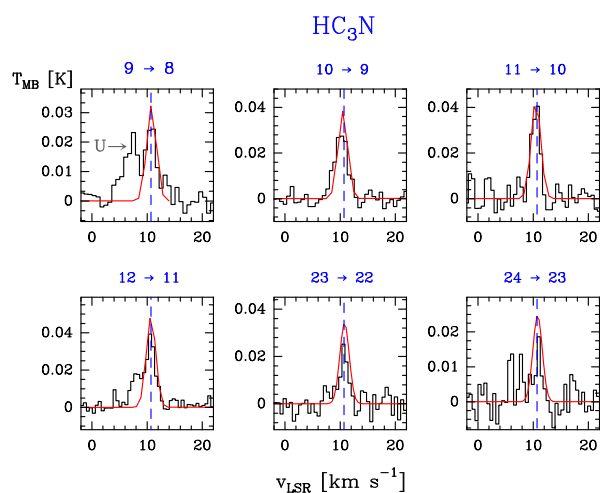


Fig. 9. Example of HC_3N detected lines (black histogram spectra). A non-LTE LVG model ($T_k \approx 80$ K, $n(\text{H}_2) \approx 1 \times 10^6 \text{ cm}^{-3}$, $N(\text{HC}_3\text{N}) = 4.0 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$) is shown overlaid in red (see Sect. 5.2).

et al. 1977; Anttila et al. 1993; Šimečková et al. 2004; Cazzoli & Pazzarini 2006; Müller et al. 2009). Transitions with different K but the same J occur in narrow frequency regions but they have quite different energies (see Fig. 10).

We detected 18 lines of A- CH_3CN (in the $K = 0$ and 3 ladders) with $E_u/k \leq 184.4$ K, 23 lines for the E- CH_3CN (in the $K = 1, 2$, and 4 ladders) with $E_u/k \leq 199.0$ K, and three lines corresponding to several fully overlapped A-E transitions. Examples of line profiles of A- and E- CH_3CN lines are shown

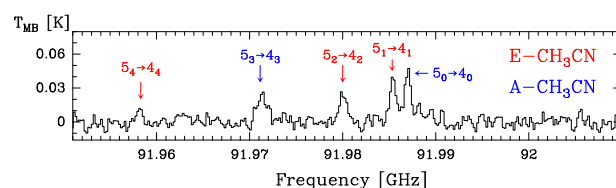


Fig. 10. Observed emission lines from the $J = 5 \rightarrow 4$ transitions of CH_3CN . Transitions with different K but the same J occur in narrow frequency regions despite they have different level energies.

in Fig. 11. Table B.9 gives the observed line parameters. We did not detect the CH_3NC isomer (see Sect. 5.6).

3.9. Methanol: CH_3OH

Methanol, CH_3OH , is the simplest alcohol molecule. It is a slightly asymmetric rotor showing hindered internal rotation. Its energy levels are classified as a symmetric rotor with quantum number J_K and a threefold barrier that causes two states in the molecule, A and E; the latter being doubly degenerate (e.g. Lees & Baker 1968; Lees et al. 1973; Xu et al. 2008).

We detected 20 lines of A- CH_3OH (in the $|K| = 0$ and 1 ladders) with $E_u/k \leq 104.4$ K, 33 lines for the E- CH_3OH (in the $|K| = 1, 2, 3$, and 4 ladders) with $E_u/k \leq 114.8$ K, and two lines corresponding to several fully overlapped A-E transitions. Examples of line profiles of A- and E- CH_3OH lines are shown in Fig. 12. Table B.10 gives the observed line parameters.

3.10. Acetaldehyde: CH_3CHO

Acetaldehyde, CH_3CHO , is an asymmetric-top molecule with A and E symmetry states and a - and b -type transitions (e.g. Kleiner et al. 1996, and references therein).

We detected 18 lines of A- CH_3CHO , 15 lines of E- CH_3CHO , and three lines corresponding to a fully overlapped A-E transition (a -type transitions with $E_u/k \leq 109.7$ K). Figure 13 shows a selection of detected lines and Table B.11 gives the observed line parameters.

4. Spatial distribution of C^{18}O and H_2CO

Figure 1 shows the spatial distribution of the rotationally excited C^{18}O $J = 3 \rightarrow 2$ ($E_u/k \approx 32$ K, $A_{ul} \approx 2 \times 10^{-6} \text{ s}^{-1}$) and H_2CO $J_{K_a, K_c} = 5_{1,5} \rightarrow 4_{1,4}$ ($E_u/k \approx 47$ K, $A_{ul} \approx 1 \times 10^{-3} \text{ s}^{-1}$) lines along the Bar. The molecular dissociation front (DF) is traced by the vibrationally excited H_2 $v = 1 \rightarrow 0$ $S(1)$ line emission (H_2^+ ; black contours in Fig. 1; Walmsley et al. 2000). The red contours represent the O I fluorescent line at $1.32 \mu\text{m}$ (Walmsley et al. 2000) marking the position of the ionisation front (IF) that separates the H II region and the neutral cloud. The blue contours represent the H^{13}CN $J = 1 \rightarrow 0$ emission tracing dense molecular clumps inside the Bar (Lis & Schilke 2003).

The emission from the Orion Bar can be distinguished from the extended OMC-1 cloud component by the emission LSR velocity. While OMC-1 is brighter in the $8 - 10 \text{ km s}^{-1}$ velocity range, the Orion Bar emits predominantly in the $10 - 11 \text{ km s}^{-1}$ range. The C^{18}O and H_2CO line emissions shown in Fig. 1 are integrated in this latter interval. In these maps, H_2CO peaks at the position of the dense ($n(\text{H}_2) \approx 6 \times 10^6 \text{ cm}^{-3}$) and lukewarm ($T_k \approx 50$ K) clumps inside the Bar (Lis & Schilke 2003). In addition, our maps reveal extended H_2CO emission along the PDR

S. Cuadrado et al.: Complex organic molecules in strongly UV-irradiated gas

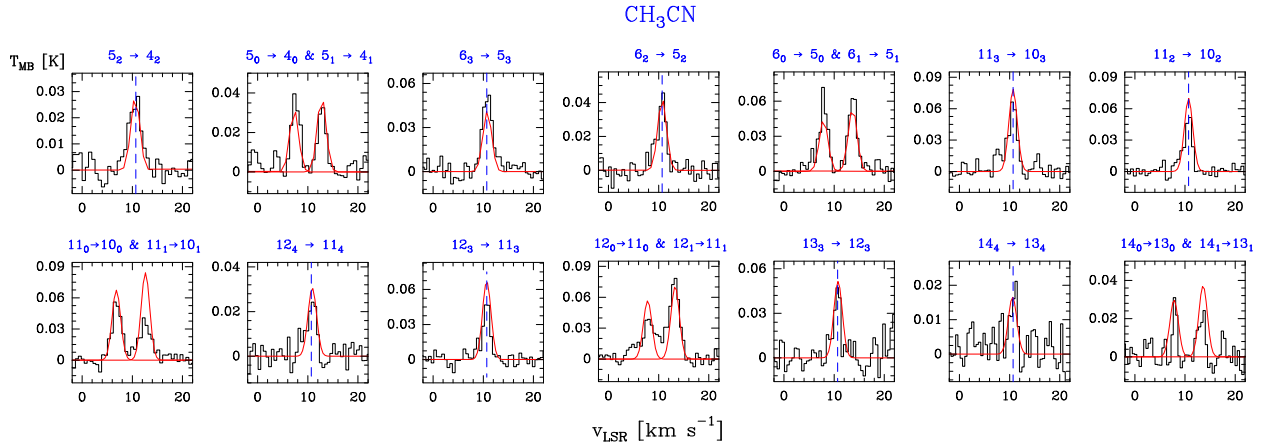


Fig. 11. Example of A- and E-CH₃CN lines (black histogram spectra). A non-LTE LVG model ($T_k \simeq 150$ K, $n(\text{H}_2) \simeq 1 \times 10^6 \text{ cm}^{-3}$, $N(\text{A-CH}_3\text{CN}) = 5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, and $N(\text{E-CH}_3\text{CN}) = 6 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$) is shown overlaid in red (see Sect. 5.2).

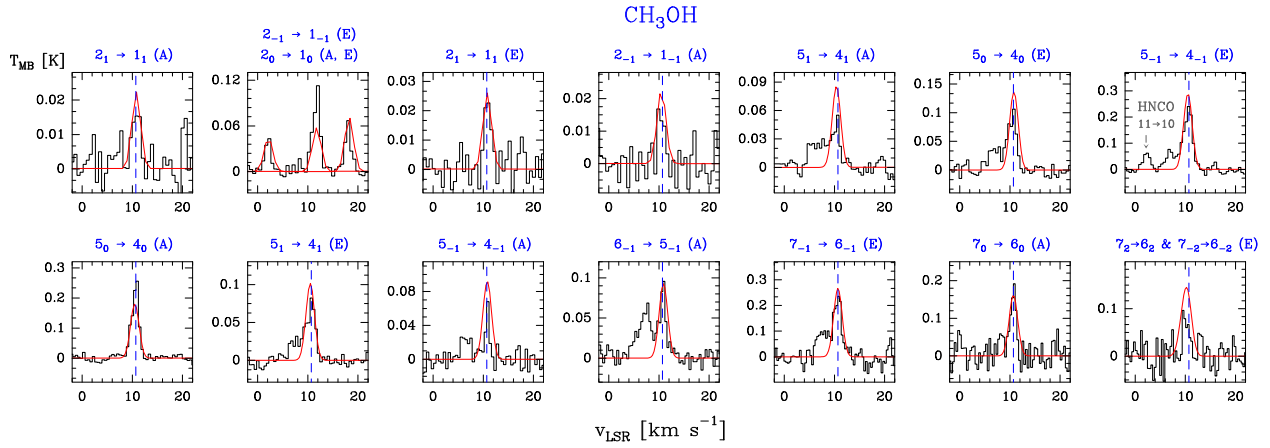


Fig. 12. Example of A- and E-CH₃OH lines (black histogram spectra). A non-LTE LVG model ($T_k \simeq 40$ K, $n(\text{H}_2) \simeq 3 \times 10^7 \text{ cm}^{-3}$, $N(\text{A-CH}_3\text{OH}) = 1.2 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$, and $N(\text{E-CH}_3\text{OH}) = 1.9 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$) is shown overlaid in red (see Sect. 5.2).

and close to the DF. This conclusion was initially inferred by Leurini et al. (2010) from $\sim 11''$ resolution observations of lower-excitation H₂CO lines.

To investigate the chemical stratification as a function of FUV flux attenuation, we built averaged line intensity crosscuts perpendicular to the Bar. The maps were rotated by 50° to bring the incident FUV radiation from left, and then, line intensities in the mapped area were averaged parallel to the IF. In Fig. 14 we plot the resulting normalised intensity cuts as a function of distance to the IF position. Distances are in arcseconds and increase with depth into the molecular cloud. Although these cuts do not represent true abundance variations (different lines have different excitation conditions), to first order they can be used to study the chemical stratification in the PDR. The H₂⁺ emission peak is at $\sim 15''$ (vertical dot-dashed line) from the IF, and shows a narrow emission profile. The H₂CO $J_{K_a, K_c} = 5_{1,5} \rightarrow 4_{1,4}$ emission peak appears at $\sim 27''$, followed by C¹⁸O $J = 3 \rightarrow 2$ that peaks at $\sim 35''$.

We note that the different position of the emission peaks of the C¹⁸O $J = 3 \rightarrow 2$ and H₂CO $J_{K_a, K_c} = 5_{1,5} \rightarrow 4_{1,4}$ lines shown in Fig. 14 could be related to a sharp thermal gradient in the region, with the gas temperature increasing from ~ 50 K inside the dense clumps seen in the PDR interior (Lis & Schilke 2003),

to ~ 300 K near the DF. The H₂CO $J_{K_a, K_c} = 5_{1,5} \rightarrow 4_{1,4}$ line requires higher excitation conditions (higher temperature/density) and thus it would naturally peak closer to the DF than the C¹⁸O $J = 3 \rightarrow 2$ line, even for constant H₂CO and C¹⁸O abundances throughout the PDR. Still, the main point is that observations show that H₂CO is present in the warm interclump gas and close to the PDR edge where the FUV flux is strong.

5. Analysis

5.1. Line parameter fitting procedure

Detected lines show simple Gaussian line profiles centred at the Orion Bar LSR velocity and thus Gaussian profiles were fitted to all detected lines. For the resolved and unblended COM lines detected with significant S/N, the mean line width is $\Delta v = 1.8 \text{ km s}^{-1}$, with a standard deviation of $\sigma = 0.6 \text{ km s}^{-1}$.

The spectroscopic and observational line parameters of the detected lines are given in Tables B.1-B.11. We provide line frequencies (in MHz), energy of the upper level of each transition (E_u/k in K), Einstein coefficient for spontaneous emission (A_{ul} in s⁻¹), intrinsic line strength (S_{ul}), and the level degeneracy (g_u) from the MADEX spectral catalogue, and the JPL and CDMS molecular databases. The velocity-integrated intensity ($\int T_{\text{MB}} dv$

S. Cuadrado et al.: Complex organic molecules in strongly UV-irradiated gas

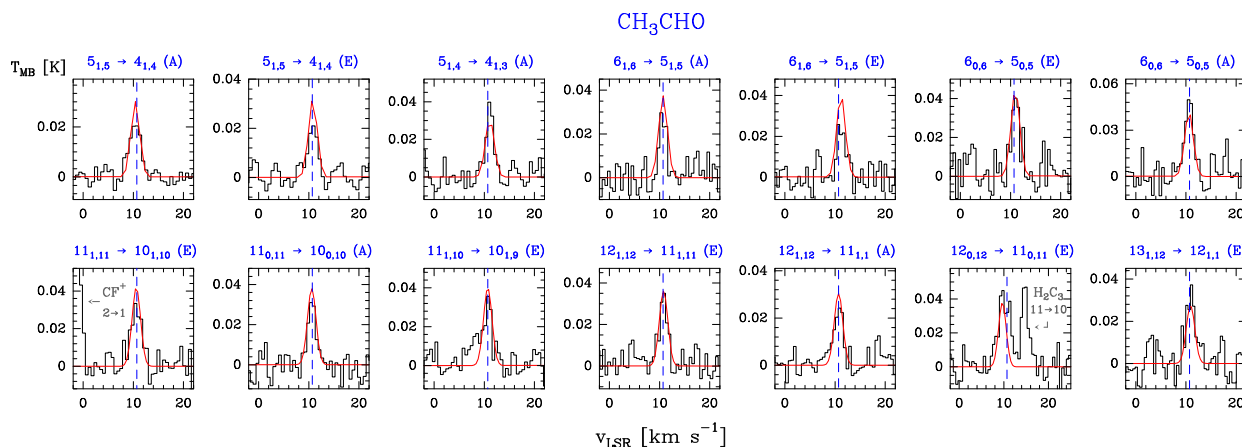


Fig. 13. Examples of A- and E-CH₃CHO lines (black histogram spectra). Single excitation temperature models are shown overlaid in red (see Sect. 5.4).

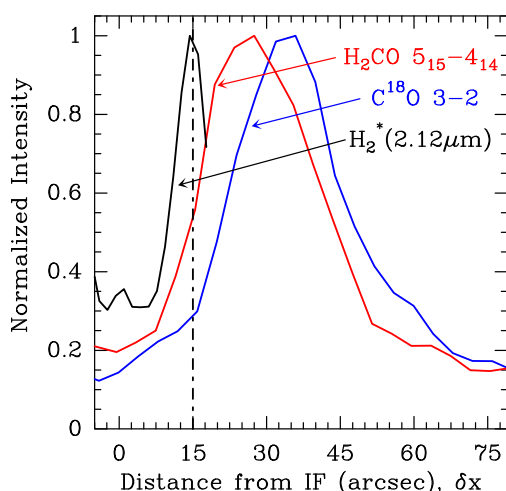


Fig. 14. Normalised intensity crosscuts for C¹⁸O $J = 3 \rightarrow 2$ (blue curve), H₂CO $J_{K_a,K_c} = 5_{1,5} \rightarrow 4_{1,4}$ (red curve), and H₂* (black curve) as a function of distance from the IF (in arcsec). The vertical dot-dashed line indicates the H₂ dissociation front. FUV radiation comes from left.

in mK km s⁻¹, LSR velocity (v_{LSR} in km s⁻¹), FWHM (full width at half maximum) line width (Δv in km s⁻¹), and the line peak temperature (T_{MB} in mK) were obtained from Gaussian fits. Parentheses indicate the uncertainty. When two or more transitions were found to be overlapping, the total profile was fitted. Fully overlapping transitions are marked with connecting symbols in the tables.

5.2. Non-LTE LVG excitation analysis: physical conditions

We estimate the beam-averaged physical conditions towards the line survey position from non-LTE (local thermodynamic equilibrium) excitation models for molecules with known inelastic collisional rate coefficients (H₂CO, HC₃N, CH₃CN, and CH₃OH)⁴. In particular, we run a large grid of non-LTE excita-

tion and radiative transfer models in which the statistical equilibrium equations are explicitly solved in the LVG (large velocity gradient) approximation using MADEX (Cernicharo 2012, see also Appendix A in Cuadrado et al. 2015).

We tested a broad range of column density (N), H₂ density ($n(\text{H}_2) = 10^3 - 10^9 \text{ cm}^{-3}$), and gas temperature ($T_k = 10 - 1000 \text{ K}$) values. We adopted $\Delta v = 2 \text{ km s}^{-1}$ line widths. In order to constrain the physical conditions that reproduce the observed line intensities and line profiles towards the observed position, we compared the observed H₂CO, CH₃OH, CH₃CN, and HC₃N lines to synthetic lines obtained from the grid of LVG models. The best fit model (assuming uniform beam filling emission) was obtained by finding the minimum root mean square (rms); we refer to Cuadrado et al. (2015) for a detailed explanation. The range of column densities that we used as an input in the models is around the value derived from the rotational diagrams analysis (see Sect. 5.4). In fact, the best fit models have column densities within a factor of 2 (see Table 3) of the inferred value from the rotational diagram analysis (we note that in these models the observed lines are optically thin). Figure 15 represents the $\text{rms}_{\text{min}}/\text{rms}$ ratio as a function of T_k and $n(\text{H}_2)$ for a grid of excitation models trying to fit the observed lines towards the PDR position.

From the excitation analysis it seems that not all COMs arise from the same PDR layers (i.e. same cloud depth). The set of beam-averaged physical conditions that best fit the CH₃CN and H₂CO lines lie within $T_k = 150 - 250 \text{ K}$ and $n(\text{H}_2) = (1 - 3) \times 10^6 \text{ cm}^{-3}$, similar (although slightly denser gas) to that obtained for C₂H in Cuadrado et al. (2015). Figures 3 and 11 show the best fit models overlaid over the observed lines. The HC₃N detected lines (see Fig. 9) fit within $T_k = 70 - 90 \text{ K}$ and $n(\text{H}_2) > 1 \times 10^6 \text{ cm}^{-3}$. The physical conditions that fit the CH₃OH detected lines (see Fig. 12) are colder and denser ($T_k = 40 - 50 \text{ K}$ and $n(\text{H}_2) \approx 5 \times 10^7 \text{ cm}^{-3}$). The best-fit parameters ($n(\text{H}_2)$, T_k , and N) of the LVG models fitting the lines in Fig. 3, 9, 11, and 12 are shown in Table 3. We note, however, that the best fit density value depends on the assumed emission beam filling factor⁵ for each molecule. Lower densities (by a factor of

⁴ We used [H₂CO-H₂] collisional rates for ortho and para H₂CO (Green 1991), [A/E-CH₃OH-H₂] for A- and E-CH₃OH (Rabli & Flower 2010), [A/E-CH₃CN-H₂] for A- and E-CH₃CN (Green 1986), and [HC₃N-H₂] for HC₃N (Wernli et al. 2007).

⁵ Assuming that the emission source has a 2D Gaussian shape, the beam filling factor (η_{bf}) is equal to $\eta_{\text{bf}} = \theta_s^2 / (\theta_s^2 + \theta_b^2)$, with θ_b the HPBW of the 30 m telescope (in arcsec) and θ_s the diameter of the Gaussian source (also in arcsec). For the semi-extended emission we assumed that $\theta_s = 9''$ (see Sect. 5.4).

S. Cuadrado et al.: Complex organic molecules in strongly UV-irradiated gas

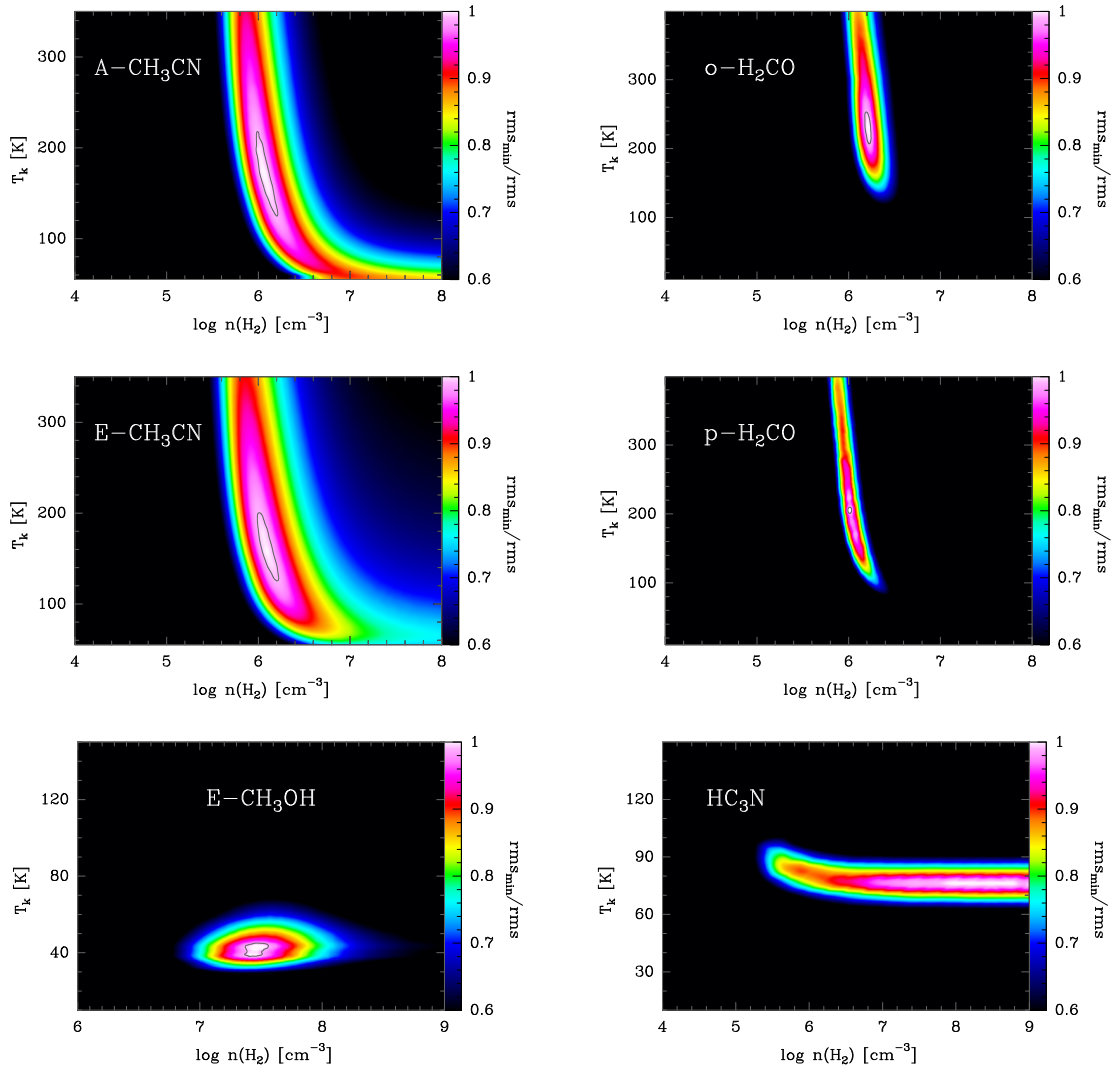


Fig. 15. Grid of LVG excitation and radiative transfer models for CH_3CN , H_2CO , CH_3OH , and HC_3N lines towards the PDR position assuming uniform beam filling and using column densities shown in Table 3. The best fits are those with the higher $\text{rms}_{\min} / \text{rms}$ value.

up to ~ 10) would still be consistent with observations if one assumes a semi-extended emission source (i.e. more compact than the beam-size at each observed frequency; see Sect. 5.4).

Higher-angular-resolution maps are needed to spatially resolve the structures producing the molecular emission (Goicoechea et al. 2016). Either way, CH_3OH and HC_3N seem to arise from a different, cooler component where the FUV flux has been attenuated. This scenario agrees with the different H_2CO and CH_3OH spatial distributions observed by Leurini et al. (2010) with the IRAM 30 m telescope and the PdB interferometer. In particular, Leurini et al. found that both species show different spatial distributions, with CH_3OH only tracing the denser and cooler clumps seen deeper inside the Bar, whereas H_2CO also traces the warmer extended (interclump) gas directly exposed to the strong FUV-field. Consistent with previous works (Goicoechea et al. 2011, 2016; Nagy et al. 2013), we derive very high thermal gas pressures at the PDR edge ($P_{\text{th}}/k = n_{\text{H}} T_{\text{K}} \gtrsim 10^8 \text{ K cm}^{-3}$).

Table 3. Best fit LVG model parameters and comparison with the column density obtained with the rotational diagram (RD) analysis.

	LVG calculations			RD analysis*
	T_{K} [K]	$n(\text{H}_2)$ [cm^{-3}]	$N(\text{X})_{\text{LVG}}$ [cm^{-2}]	$N(\text{X})_{\text{RD}}$ [cm^{-2}]
o- H_2CO	~ 200	$\sim 10^6$	4.0×10^{13}	$(4.4 \pm 0.6) \times 10^{13}$
p- H_2CO	~ 200	$\sim 10^6$	1.8×10^{13}	$(1.6 \pm 0.1) \times 10^{13}$
HC_3N	~ 80	$\sim 10^6$	4.0×10^{11}	$(4.2 \pm 0.3) \times 10^{11}$
A- CH_3CN	~ 150	$\sim 10^6$	5.0×10^{11}	$(5.8 \pm 0.8) \times 10^{11}$
E- CH_3CN	~ 150	$\sim 10^6$	6.0×10^{11}	$(5.7 \pm 0.7) \times 10^{11}$
E- CH_3OH	~ 40	$\sim 3 \times 10^7$	1.9×10^{13}	$(1.9 \pm 0.2) \times 10^{13}$

Notes. * Rotational diagram analysis assuming uniform beam filling (see Sect. 5.4).

S. Cuadrado et al.: Complex organic molecules in strongly UV-irradiated gas

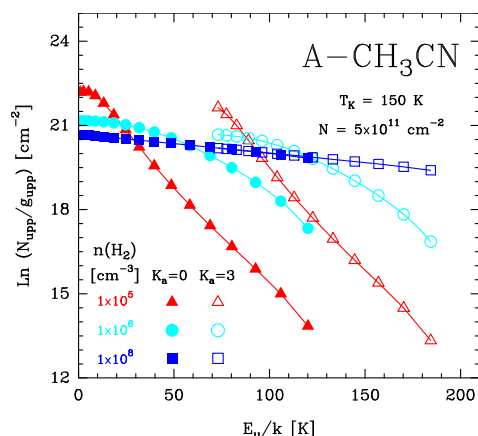


Fig. 16. Rotational population diagrams for A-CH₃CN computed with a non-LTE excitation code. All models adopt the same gas temperature ($T_k = 150$ K) and column density ($N_{\text{tot}} = 5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$), but three different $n(\text{H}_2)$ values. For simplicity, only rotational transitions in the $K_a = 0$ (filled symbols) and 3 (empty symbols) ladders are shown.

5.3. Subthermal excitation effects on the rotational diagrams of symmetric- and asymmetric-top molecules

In this Section we show how subthermal excitation effects modify the resulting rotational population diagram of symmetric- and asymmetric-top molecules such as CH₃CN and H₂CO, respectively. In particular we run a grid of LVG models for varying gas densities, but keeping the same gas temperature and column density. Figures 16 and 17 show model results in the form of population diagrams for A-CH₃CN transitions in the $K_a = 0$ and 3 rotational ladders ($T_k = 150$ K and $N_{\text{tot}} = 5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$), and for p-H₂CO in the $K_a = 0$ and 2 rotational ladders ($T_k = 200$ K and $N_{\text{tot}} = 1.8 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$). Only at very high gas densities, higher than the critical density for collisional excitation ($n \gg n_{\text{cr}}$), do inelastic collisions drive the level populations close to LTE ($T_{\text{rot}} \approx T_k$). In a rotational diagram, the K_a ladders merge in a single straight line with a slope equal to $-1/T_k$. Owing to the high gas densities, this characteristic straight diagram is typically seen towards hot cores (e.g. Bisschop et al. 2007). As the gas density decreases, the excitation becomes subthermal ($T_{\text{rot}} < T_k$), and the rotational population diagram starts to show separate rotational ladders for each set of transitions with the same K_a quantum number. For very polar molecules such as CH₃CN and H₂CO (thus high n_{cr}), subthermal excitation happens at relatively high densities. Therefore, accurate column densities and rotational temperatures from rotational diagrams can only be obtained if the individual column densities for each rotational ladder are computed independently. This likely explains the discrepancy with the high T_{rot} obtained by Nagy et al. (2017) in the rotational diagram of their submm o-H₂CO lines observed with Herschel/HIFI towards the Bar.

5.4. Rotational diagrams and column-density determination

We determined the beam-averaged column density (N) and the rotational temperature (T_{rot}) for each molecule found by building rotational diagrams (e.g. Goldsmith & Langer 1999; Cuadrado et al. 2015). The large number of detected lines allows us to accurately determine rotational temperatures and column densities. Optically thin emission is assumed (consistent with our best LVG models of H₂CO, HC₃N, CH₃CN, and CH₃OH). We note

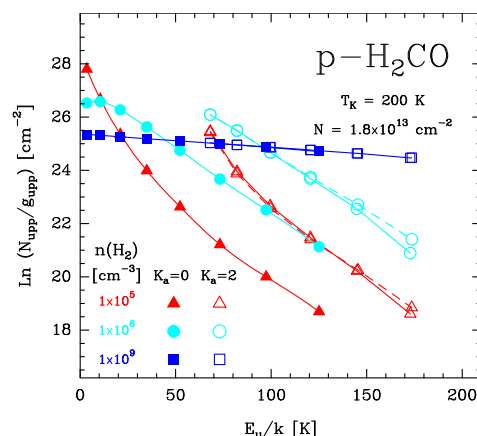


Fig. 17. Rotational population diagrams for p-H₂CO computed with a non-LTE excitation code. All models adopt the same gas temperature ($T_k = 200$ K) and column density ($N_{\text{tot}} = 1.8 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$), but three different $n(\text{H}_2)$ values. For simplicity, only rotational transitions in the $K_a = 0$ (filled symbols) and 2 (empty symbols) ladders are shown. We note that at densities $< 10^8 \text{ cm}^{-3}$, the set of transitions with the $K_a = 2$ number are also split into two components: (i) transitions with $K_c = J - 1$ (empty symbols connected with solid lines) and (ii) transitions with $K_c = J - 2$ (empty symbols connected with dashed lines).

that owing to their specific spectroscopy and prevailing excitation conditions at the edge of the Bar (subthermal excitation), a correct determination of the rotational temperatures and column densities for species such as H₂CO, H₂CS, H₂CCO, CH₃OH, and CH₃CN requires building specific diagrams for each rotational ladder (see Sect. 5.3). For the molecules with known collisional rates, we determine $N_{\text{LVG}} \approx N_{\text{RD}}$ (within a factor of 2). This comparison shows that the N_{RD} computed for the other molecules are accurate.

The rotational diagrams were built considering two limiting cases: (i) That the detected emission is extended (i.e. uniform beam filling), with $\eta_{\text{bf}} = 1$; and (ii) that the emission is semi-extended, assuming that $\theta_s = 9''$ (the typical beam of the IRAM 30 m telescope at $\sim 1 \text{ mm}$)⁶. We only considered lines not blended with other transitions and detected above a 3σ level. The resulting rotational diagrams are shown in Fig. 18. Rotational temperatures and column densities obtained by linear least squares fits are listed in Table 4. The uncertainties shown in Table 4 indicate the uncertainty obtained from the least squares fit to the rotational diagram. The uncertainty obtained in the determination of the line parameters with the Gaussian fitting programme are included in the uncertainty bars at each point of the rotational diagram.

For H₂CO, H₂¹³CO, H₂CS, H₂CCO, A-CH₃OH, A-CH₃CN, and E-CH₃CN we have built specific rotational diagrams for different sets of transitions with the same K_a quantum number value. The total column density of the molecule is obtained by adding the column density of each rotational ladder. For the other molecules, it is possible to fit the observed transitions by a single T_{rot} and N , independently of the K_a value. The cis- and trans-HCOOH rotational diagrams are shown in Cuadrado et al. (2016).

For molecules with hyperfine structure, like that of HCO, each rotational transition was described without splits, only with a single rotational number N . For this purpose, the integrated intensity, W , level degeneracy, g , and line strength, S , of each transition was calculated as the sum of all allowed hyperfine compo-

S. Cuadrado et al.: Complex organic molecules in strongly UV-irradiated gas

Table 4. Rotational temperatures (T_{rot}), column densities (N), and abundances with respect to hydrogen nuclei inferred in the Orion Bar PDR.

	Uniform beam filling		Semi-extended source		Abundance*	Notes
	T_{rot} [K]	$N(X)$ [cm ⁻²]	T_{rot} [K]	$N(X)$ [cm ⁻²]		
HCO	15 ± 2	(1.1 ± 0.3) × 10 ¹³	9 ± 2	(5.3 ± 3.5) × 10 ¹³	(1.7 – 8.4) × 10 ⁻¹⁰	a
o-H ₂ CO $K_a = 1$	17 ± 2	(3.7 ± 0.6) × 10 ¹³	12 ± 1	(1.1 ± 0.3) × 10 ¹⁴		a
o-H ₂ CO $K_a = 3$	17	(6.9 ± 1.0) × 10 ¹²	12	(1.1 ± 0.2) × 10 ¹³		b,c
p-H ₂ CO $K_a = 0$	16 ± 2	(9.8 ± 1.4) × 10 ¹²	9 ± 1	(3.9 ± 0.6) × 10 ¹³		a,c
p-H ₂ CO $K_a = 2$	18 ± 1	(6.2 ± 0.2) × 10 ¹²	13 ± 1	(1.3 ± 0.1) × 10 ¹³		a,c
[(o+p)-H ₂ CO]	—	(6.0 ± 0.6) × 10 ¹³	—	(1.7 ± 0.3) × 10 ¹⁴	(0.9 – 2.7) × 10 ⁻⁹	d
o-H ₂ ¹³ CO	15 ± 3	(7.3 ± 2.4) × 10 ¹¹	10 ± 2	(3.0 ± 1.1) × 10 ¹²		a
p-H ₂ ¹³ CO	9 ± 1	(2.3 ± 0.4) × 10 ¹¹	7 ± 1	(8.0 ± 1.2) × 10 ¹¹		a,c
[(o+p)-H ₂ ¹³ CO]	—	(9.6 ± 2.4) × 10 ¹¹	—	(3.8 ± 1.1) × 10 ¹²	(1.5 – 6.0) × 10 ⁻¹¹	d
o-H ₂ CS $K_a = 1$	30 ± 3	(3.1 ± 0.5) × 10 ¹²	19 ± 1	(1.3 ± 0.2) × 10 ¹³		a
o-H ₂ CS $K_a = 3$	30	(6.7 ± 1.9) × 10 ¹¹	19	(2.7 ± 0.4) × 10 ¹²		e,c
p-H ₂ CS $K_a = 0$	29 ± 6	(5.0 ± 1.4) × 10 ¹¹	16 ± 2	(2.6 ± 1.0) × 10 ¹²		a
p-H ₂ CS $K_a = 2$	35 ± 8	(7.8 ± 4.4) × 10 ¹¹	15 ± 3	(2.6 ± 1.9) × 10 ¹²		a
[(o+p)-H ₂ CS]	—	(5.0 ± 0.7) × 10 ¹²	—	(2.1 ± 0.3) × 10 ¹³	(0.8 – 3.3) × 10 ⁻¹⁰	d
HNCO	51 ± 7	(1.0 ± 0.1) × 10 ¹²	26 ± 3	(5.6 ± 1.3) × 10 ¹²	(1.6 – 8.9) × 10 ⁻¹¹	a
CH₂NH	28 ± 7	(1.1 ± 0.4) × 10 ¹²	27 ± 7	(2.4 ± 1.0) × 10 ¹²	(1.7 – 3.8) × 10 ⁻¹¹	a
o-H ₂ CCO $K_a = 1$	55 ± 2	(3.0 ± 0.1) × 10 ¹²	30 ± 2	(1.3 ± 0.2) × 10 ¹³		a
o-H ₂ CCO $K_a = 3$	64 ± 6	(1.3 ± 0.3) × 10 ¹²	34 ± 1	(4.2 ± 0.7) × 10 ¹²		a
p-H ₂ CCO $K_a = 0$	57 ± 4	(4.8 ± 0.6) × 10 ¹¹	42 ± 3	(1.3 ± 0.2) × 10 ¹²		a
p-H ₂ CCO $K_a = 2$	54 ± 3	(1.1 ± 0.1) × 10 ¹²	29 ± 2	(6.1 ± 1.8) × 10 ¹²		a
[(o+p)-H ₂ CCO]	—	(5.9 ± 0.3) × 10 ¹²	—	(2.5 ± 0.3) × 10 ¹³	(0.9 – 4.0) × 10 ⁻¹⁰	d
HC₃N	43 ± 2	(4.2 ± 0.3) × 10 ¹¹	27 ± 1	(3.2 ± 0.3) × 10 ¹²	(0.7 – 5.1) × 10 ⁻¹¹	a
cis-HCOOH	23 ± 4	(4.6 ± 0.7) × 10 ¹¹	21 ± 4	(4.2 ± 0.6) × 10 ¹²		f
trans-HCOOH $K_a = 0$	12 ± 2	(3.5 ± 0.5) × 10 ¹¹	6 ± 1	(4.1 ± 0.6) × 10 ¹²		f
trans-HCOOH $K_a = 1$	12 ± 3	(3.3 ± 1.3) × 10 ¹¹	6 ± 1	(3.6 ± 2.1) × 10 ¹²		f
trans-HCOOH $K_a = 2$	13 ± 3	(6.3 ± 2.8) × 10 ¹¹	7 ± 1	(5.0 ± 2.4) × 10 ¹²		f
[(cis+trans)-HCOOH]	—	(1.8 ± 0.3) × 10 ¹²	—	(1.7 ± 0.3) × 10 ¹³	(0.3 – 2.7) × 10 ⁻¹⁰	g
A-CH ₃ CN $K_a = 0$	26 ± 2	(2.8 ± 0.5) × 10 ¹¹	19 ± 1	(1.9 ± 0.6) × 10 ¹²		a
A-CH ₃ CN $K_a = 3$	30 ± 1	(3.0 ± 0.6) × 10 ¹¹	21 ± 1	(1.5 ± 0.6) × 10 ¹²		a
E-CH ₃ CN $K_a = 1$	28 ± 2	(2.9 ± 0.5) × 10 ¹¹	20 ± 1	(1.8 ± 0.4) × 10 ¹²		a
E-CH ₃ CN $K_a = 2$	31 ± 1	(1.7 ± 0.2) × 10 ¹¹	22 ± 1	(1.0 ± 0.3) × 10 ¹²		a
E-CH ₃ CN $K_a = 4$	26 ± 1	(1.1 ± 0.4) × 10 ¹¹	18 ± 1	(6.7 ± 3.2) × 10 ¹¹		a
[(A+E)-CH ₃ CN]	—	(1.2 ± 0.1) × 10 ¹²	—	(6.9 ± 1.0) × 10 ¹²	(0.2 – 1.1) × 10 ⁻¹⁰	h
A-CH ₃ OH $K_a = 0$	34 ± 2	(8.0 ± 0.6) × 10 ¹²	18 ± 2	(5.3 ± 1.1) × 10 ¹³		a
A-CH ₃ OH $K_a = \pm 1$	26 ± 2	(3.5 ± 0.9) × 10 ¹²	14 ± 1	(2.8 ± 0.7) × 10 ¹³		a
E-CH ₃ OH	36 ± 3	(1.9 ± 0.2) × 10 ¹³	26 ± 3	(6.5 ± 1.4) × 10 ¹³		a
[(A+E)-CH ₃ OH]	—	(3.1 ± 0.2) × 10 ¹³	—	(1.5 ± 0.2) × 10 ¹⁴	(0.5 – 2.4) × 10 ⁻⁹	h
A-CH ₃ CHO	31 ± 2	(2.3 ± 0.3) × 10 ¹²	20 ± 1	(1.2 ± 0.2) × 10 ¹³		a
E-CH ₃ CHO	33 ± 3	(2.6 ± 0.4) × 10 ¹²	21 ± 1	(1.2 ± 0.2) × 10 ¹³		a
[(A+E)-CH ₃ CHO]	—	(4.9 ± 0.5) × 10 ¹²	—	(2.4 ± 0.3) × 10 ¹³	(0.8 – 3.8) × 10 ⁻¹⁰	h

Notes. * The abundance of each species with respect to H nuclei is given by $\frac{N(X)}{N_H} = \frac{N(X)}{N(H) + 2N(H_2)}$, with $N(H_2) \approx 3 \times 10^{22} \text{ cm}^{-2}$ and $N(H) \approx 3 \times 10^{21} \text{ cm}^{-2}$ (van der Werf et al. 2013). (a) T_{rot} and N from rotational diagram analysis. (b) Only two lines detected with the same E_u/k . N calculated assuming the same T_{rot} that o-H₂CO $K_a = 1$. (c) ΔN estimated assuming a 15% of the calculated N . (d) Total N calculated as the sum of the ortho and para species. (e) Only two lines detected with upper level energies of 138.3 K and 149.8 K. They are too similar for an accurate estimation of T_{rot} and N from a rotational diagram analysis. N calculated assuming the same T_{rot} that o-H₂CS $K_a = 1$. (f) From Cuadrado et al. (2016). (g) Total N calculated as the sum of the cis and trans species. (h) Total N calculated as the sum of the A and E species.

S. Cuadrado et al.: Complex organic molecules in strongly UV-irradiated gas

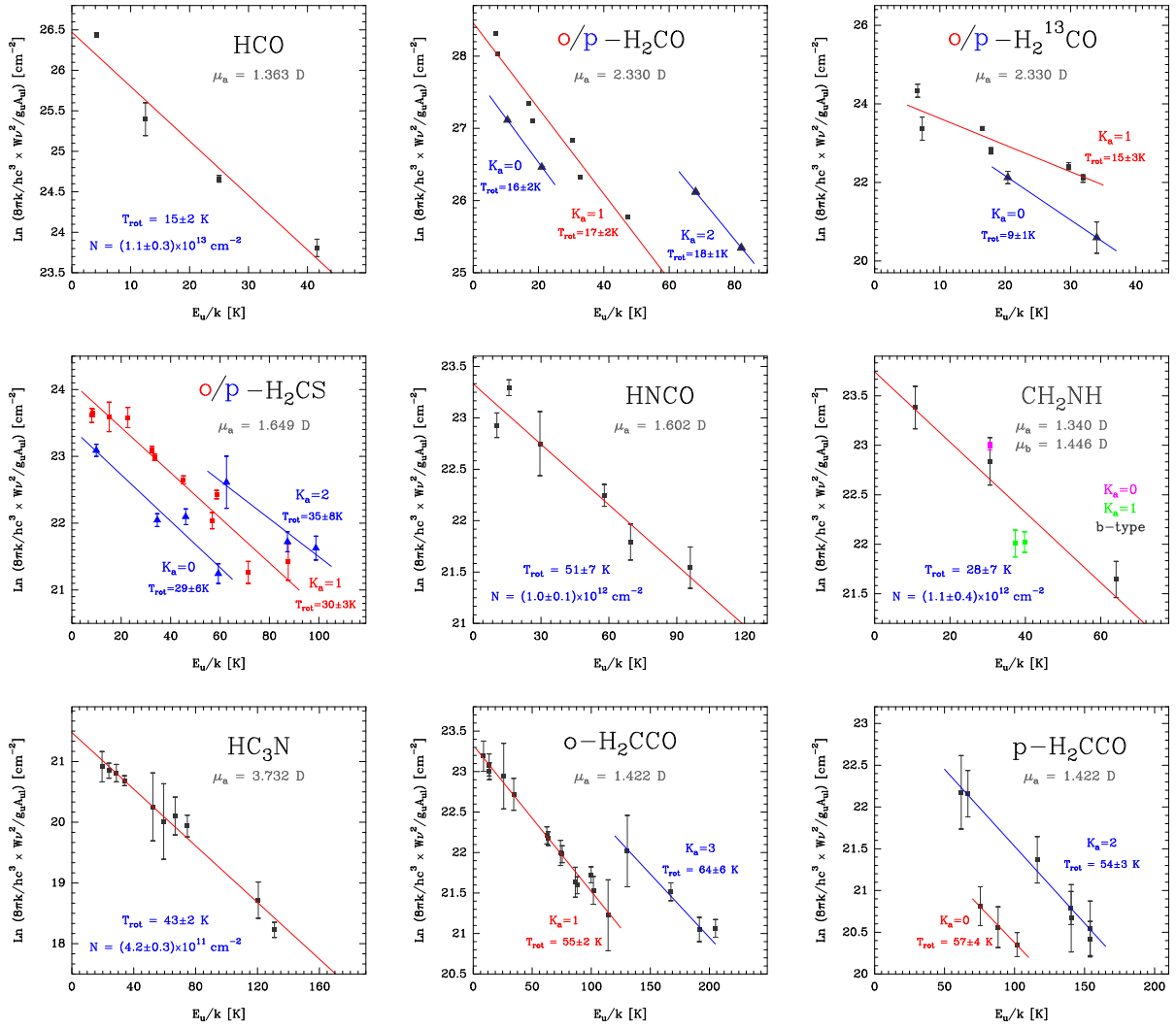


Fig. 18. Rotational diagrams of the detected complex molecules in the Orion Bar PDR (assuming uniform beam filling). Fitted values of the rotational temperature, T_{rot} , column density, N , and their respective uncertainties are also indicated for each molecule.

nents of each $N+1 \rightarrow N$ transition. The characteristic frequency, ν , was determined using the weighted average with the relative strength of each line as weight, and the Einstein coefficient, A , was calculated using the weighted values in the usual relation.

Comparing the resulting rotational diagrams, we see that: (i) H_2CO and CH_3OH are, by far, the most abundant organic molecules (by a factor of ≥ 5), followed by HCO , H_2CCO , CH_3CHO , H_2CS , HCOOH , CH_3CN , CH_2NH , HNCO , H_2^{13}CO , and HC_3N (in decreasing order of abundance); (ii) the ortho-para (OTP) ratios obtained from the H_2CO , H_2^{13}CO , H_2CS , H_2CCO column densities are ~ 3 , as expected at high gas temperature; (iii) we obtain similar rotational temperatures for ortho-para and A-E species; (iv) and the inferred $[\text{H}_2\text{CO}]/[\text{H}_2^{13}\text{CO}]$ ratio is 63 ± 3 , similar to the $^{12}\text{C}/^{13}\text{C} \approx 67$ isotopic ratio in Orion (Langer & Penzias 1990). Hence, this confirms that even lines from the most abundant organic species studied in this work, are optically thin.

In order to confirm the correct line identification and possible line blendings, we have modelled the spectrum of each molecule using the MADEX radiative transfer model assuming

a Boltzmann distribution and a single excitation temperature for the rotational levels population (we recall that for the observed set of lines/ladders of a given molecule, we infer a single temperature component from the rotational diagrams). Figures 2, 5, 6, 7, 8, and 13 show the observational spectra (black histograms) and the modelled spectra (red lines) of each molecule. The obtained fits agree very well with the observations and rotational diagrams.

5.5. Abundances

In order to determine molecular abundances with respect to hydrogen nuclei⁶ towards the line survey position, we derived the beam-averaged H_2 column density from our observations of the optically thin C^{18}O lines ($J = 1 \rightarrow 0$, $2 \rightarrow 1$, and $3 \rightarrow 2$ transitions) assuming $^{16}\text{O}/^{18}\text{O} \approx 500$ (Wilson & Rood 1994) and a $[\text{CO}]/[\text{H}_2]$ abundance of $\sim 10^{-4}$ (lower than the canon-

⁶ The molecular abundance with respect to hydrogen nuclei is given by $\frac{N(X)}{N(\text{H})+2N(\text{H}_2)}$.

S. Cuadrado et al.: Complex organic molecules in strongly UV-irradiated gas

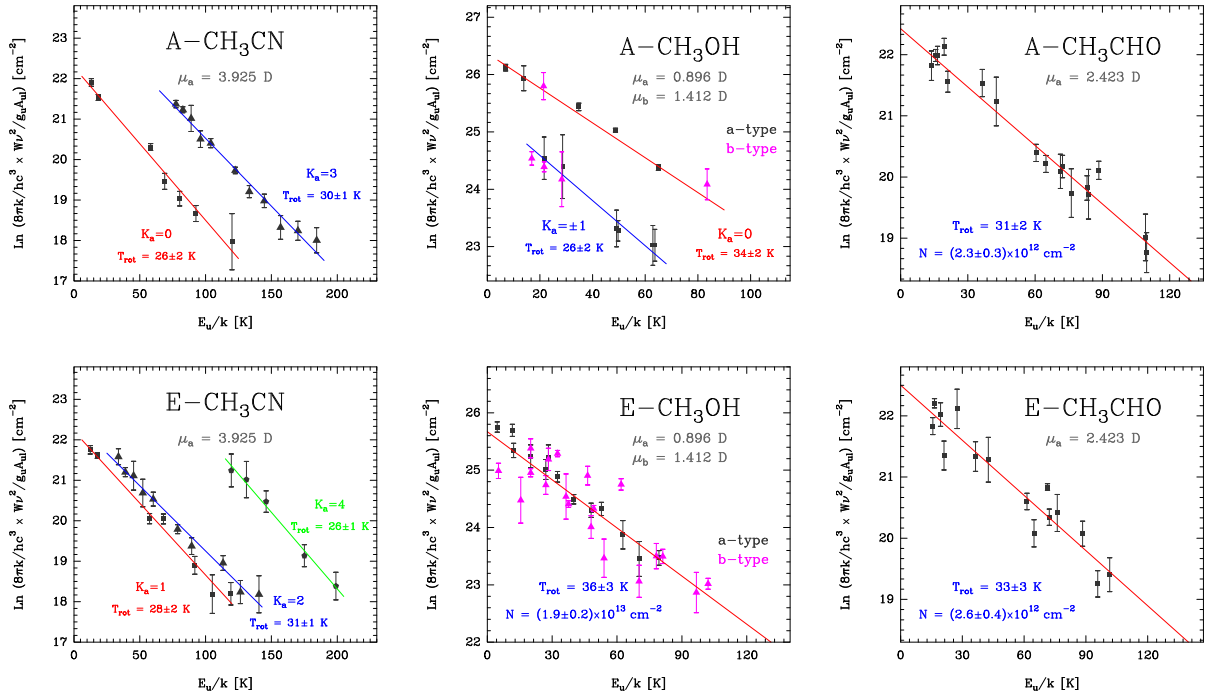


Fig. 18. Continued.

ical value due to photodissociation). The resulting H_2 column density, $N(H_2) \approx 3 \times 10^{22} \text{ cm}^{-2}$, is in good agreement with previous estimations of $N(H_2)$ close to the dissociation front (see e.g. Hogerheijde et al. 1995). A hydrogen atom column density, $N(H)$, of $\sim 3 \times 10^{21} \text{ cm}^{-2}$ has been inferred from $H I$ observations towards the edge of the Orion Bar (van der Werf et al. 2013). Molecular abundances with respect to hydrogen nuclei are listed in Table 4. The abundances of the detected species range from 10^{-9} to 10^{-11} .

5.6. Undetected complex organic molecules and precursors

The broadband frequency coverage of the survey allowed us to obtain upper limits for other chemically interesting organic molecules that have not been detected towards the edge of the PDR, but could have been expected. In particular, we searched for HDCO, CH_3O , CH_3NC , CH_3CCH , CH_3OCH_3 , $HCOOCH_3$, CH_3CH_2OH , CH_2CHCN , and CH_3CH_2CN , because they have been detected in other PDRs and star-forming regions (e.g. Horsehead, Orion KL, Barnard 1-b, or IRAS 16293-2422; see Table 6 for references). The CH_3O radical is thought to be an important intermediary for the H_2CO and CH_3OH chemistry but so far, has only been detected in cold and dense gas (Cernicharo et al. 2012; Bacmann & Faure 2016). HDCO has been detected by Parise et al. (2009) towards the lukewarm, dense and more FUV-shielded clump #3 of Lis & Schilke (2003), but it is not detected towards the warmer and high FUV-illuminated line survey position, near the dissociation front.

First, we estimated 3σ line intensities using the relation

$$\int T_{MB} dv = 3\sigma \sqrt{2\delta v \Delta v} \quad [K \text{ km s}^{-1}], \quad (1)$$

where σ is the rms of the observations per resolution channel [K], δv is the velocity spectral resolution [km s^{-1}], and Δv is the assumed line widths ($\sim 2 \text{ km s}^{-1}$). Second, we

Table 5. Upper limits for undetected COMs.

Molecule	$N(X) [\text{cm}^{-2}]$	Abundance ^a
HD CO^b	$(1.3 - 1.5) \times 10^{11}$	$(2.1 - 2.4) \times 10^{-12}$
CH_3O	$(2.0 - 4.0) \times 10^{12}$	$(3.2 - 6.3) \times 10^{-11}$
CH_3NC	$(5.0 - 8.0) \times 10^{10}$	$(0.8 - 1.3) \times 10^{-12}$
CH_3CCH	$(5.0 - 8.0) \times 10^{12}$	$(0.8 - 1.3) \times 10^{-10}$
CH_3OCH_3	$(7.0 - 9.0) \times 10^{12}$	$(1.1 - 1.4) \times 10^{-10}$
$HCOOCH_3$	$(9.0 - 9.5) \times 10^{12}$	$(1.4 - 1.5) \times 10^{-10}$
CH_3CH_2OH	$(1.0 - 1.2) \times 10^{12}$	$(1.6 - 1.9) \times 10^{-11}$
CH_2CHCN	$(9.0 - 9.5) \times 10^{12}$	$(1.4 - 1.5) \times 10^{-10}$
CH_3CH_2CN	$(7.0 - 5.0) \times 10^{11}$	$(1.1 - 0.8) \times 10^{-11}$

Notes. ^(a) The abundance of each species with respect to H nuclei (see Sect. 5.5). ^(b) Detected by Parise et al. (2009) towards clump #3 (Lis & Schilke 2003) of the Orion Bar.

used MADEX to create synthetic models that simulate the line emission to constrain their column densities. The column densities and 3σ upper limit abundances assuming $T_{rot} = 20 - 30 \text{ K}$ are listed in Table 5. We also provide the following abundance ratio upper limits: $[HD\text{CO}]/[H_2\text{CO}] < 0.003$ and $[CH_3NC]/[CH_3CN] < 0.1$. Parise et al. (2009) estimated an abundance ratio of $[HD\text{CO}]/[H_2\text{CO}] > 0.006$ towards clump #3, which suggests that the deuteration diminishes from the lukewarm and shielded clumps to the warmer and more FUV-irradiated cloud edge.

S. Cuadrado et al.: Complex organic molecules in strongly UV-irradiated gas

Table 6. Abundances relative to H_2 in different environments (in units of 10^{-10}).

Molecule	Orion Bar ^{1*}	Horsehead		Orion KL		L1157-B1 ⁷	IRAS 16293-2422 ⁸	B1-b ⁹
	PDR	PDR ^{2*}	Core ^{3*}	HC ⁴	CR ⁵	Outflow	Hot corino	Dense core
HCO	1.7	8.4 ^b	< 0.8 ^b	—	< 0.3 ^{6,g}	—	< 2.0	0.2 ⁿ
HNCO	0.2	—	—	780 ^h	—	605 ^k	1.7	0.7 ^p
H ₂ CO	9.0	2.9 ^c	2.0 ^c	1200 ^h	440 ^h	4000 ^l	7.0	4.6 ^q
H ₂ CS	0.8	—	—	150 ^h	74 ^h	1100 ^l	—	0.9 ^q
t-HCOOH [†]	0.2 ^a	0.5 ^d	0.1 ^d	800 ⁱ	—	—	< 3.0	0.1 ⁿ
CH ₂ NH	0.2	—	—	42 ^h	—	—	< 5.0	—
H ₂ CCO	0.9	1.5 ^d	0.5 ^d	—	51 ^h	—	1.8	0.2 ⁿ
HC ₃ N	0.07	0.06 ^e	0.08 ^e	81 ^h	—	100 ^l	0.3	3.1 ^r
CH ₃ OH	5.0	1.2 ^f	2.3 ^f	22000 ^h	12000 ^h	115000 ^l	44	31 ^{r,s}
CH ₃ CN	0.2	2.5 ^e	0.08 ^e	300 ^h	120 ^h	—	1.5	0.4 ^r
CH ₃ CHO	0.8	0.7 ^d	0.2 ^d	9.5 ⁱ	—	250 ^m	1.0	0.1 ⁿ
CH ₃ CCH	< 1.0	4.4 ^d	3.0 ^d	24 ⁱ	133 ^{6,i}	—	6.5	5.0 ^r

Notes.

* Abundances with respect to total hydrogen nuclei. [†] To date, the cis conformer of HCOOH has only been detected towards the Orion Bar PDR (Cuadrado et al. 2016), therefore, we only provide the abundances of the trans conformer.

(1) This work. Abundances calculated assuming uniform beam filling. Ref.: (a) Cuadrado et al. (2016).

(2) Low-UV field Horsehead PDR ($\chi \approx 60$; $N_H = 3.8 \times 10^{22} \text{ cm}^{-2}$) and (3) condensation shielded from the UV field (dense core, $N_H = 6.4 \times 10^{22} \text{ cm}^{-2}$) behind the Horsehead PDR edge. Ref.: (b) Gerin et al. (2009), (c) Guzmán et al. (2011), (d) Guzmán et al. (2014), (e) Gratier et al. (2013), (f) Guzmán et al. (2013).

(4) Orion KL Hot Core (HC); and (5) Orion KL Compact Ridge (CR). (6) Abundances calculated for the Extended Ridge. Ref.: (g) Blake et al. (1987), (h) Crockett et al. (2014), (i) B. Tercero, private communication.

(7) Peak B1 in the blue lobe of the L1157. Ref.: (k) Mendoza et al. (2014), (l) Bachiller & Pérez Gutiérrez (1997), (m) Codella et al. (2015).

(8) Low-mass protostar (hot corino) IRAS 16293-2422. The abundances are computed for a $N(H_2) = 2 \times 10^{23} \text{ cm}^{-2}$. Abundances averaged over a $\sim 20''$ beam (van Dishoeck et al. 1995).

(9) Quiescent dark core Barnard 1-b (B1-b), $N(H_2) = 1.3 \times 10^{23} \text{ cm}^{-2}$ (see e.g. Hirano et al. 1999; Lis et al. 2002). Ref.: (n) Cernicharo et al. (2012), (p) Marcelino et al. (2009), (q) Marcelino et al. (2005), (r) N. Marcelino, private communication, (s) see also Öberg et al. (2010).

6. Discussion

In order to shed more light on the possible chemical formation routes of COMs in strongly FUV-irradiated gas from an observational perspective, we compare the observed abundances of several COMs and precursors in different environments (see Table 6). In addition to the Orion Bar, we consider the Horsehead PDR (a low-FUV-flux PDR) and a nearby cold core also in the Horsehead nebula, the Orion KL hot core and compact ridge (warm dense gas at roughly the same distance to the Bar), the L1157 outflow (shocked gas), the low-mass protostar IRAS 16293-2422 (hot corino), and the quiescent dark cloud Barnard 1-b (B1-b).

6.1. COMs in different environments

Figure 19 shows a comparison between the abundances of 12 organic molecules detected in the above sources. As expected for widespread interstellar molecules, abundant H_2CO and CH_3OH are found in all sources ($N(X)/N(H_2) > 10^{-10}$). In diffuse and translucent clouds ($n(H_2) \approx 10^2 - 10^3 \text{ cm}^{-3}$), only H_2CO has been detected so far (Liszt et al. 2006), suggesting that the formation of COMs is more efficient in dense gas.

In general, the abundances of COMs, and CH_3OH in particular, are much higher towards Orion KL (hot core and compact ridge) and towards the L1157-B1 outflow. This translates into low $[X_{COM}]/[CH_3OH] \ll 1$ abundance ratios in

those environments. The Horsehead PDR, however, shows $[X_{COM}]/[CH_3OH] > 1$ ratios for $X_{COM} = HCO, H_2CO, H_2CCO, CH_3CN$, and CH_3CCH abundances. The Orion KL hot core and compact ridge show enhanced COM abundances. Owing to the very high dust temperatures ($T_d > 100 \text{ K}$), ice sublimation and subsequent warm gas-phase chemistry dominates (e.g. Blake et al. 1987). On the other hand, the abundances inferred in the hot corino IRAS 16293-2422 (lower dust temperatures) are more similar to those in the Orion Bar PDR and Horsehead. Interestingly, the L1157 outflow shows the highest abundances of $CH_3OH, H_2CO, H_2CS, HC_3N$, and CH_3CHO . This suggests that the combined effects of ice mantle sublimation, grain sputtering, and hot gas-phase chemistry in shocks results in a very efficient COM formation.

Among the studied species, only the HCO radical and cis-HCOOH (Cuadrado et al. 2016) are more abundant in PDRs. This enhancement is thus a characteristic feature of FUV-illuminated gas. Figure 20 shows normalised abundances with respect to the abundances in B1-b (cold and gas shielded from strong FUV radiation). HCO, CH_3CHO, H_2CCO, H_2CO , and t-HCOOH are a factor of $\sim 2 - 10$ more abundant in the PDRs than in the cold core.

Guzmán et al. (2014) observed two positions of the Horsehead, the moderately warm PDR ($T_k \approx 60 \text{ K}$) and a cold core behind the PDR and shielded from stellar FUV field. Interestingly, they found enhanced COM abundances in the PDR compared to the core. Given the low-FUV field in the

S. Cuadrado et al.: Complex organic molecules in strongly UV-irradiated gas

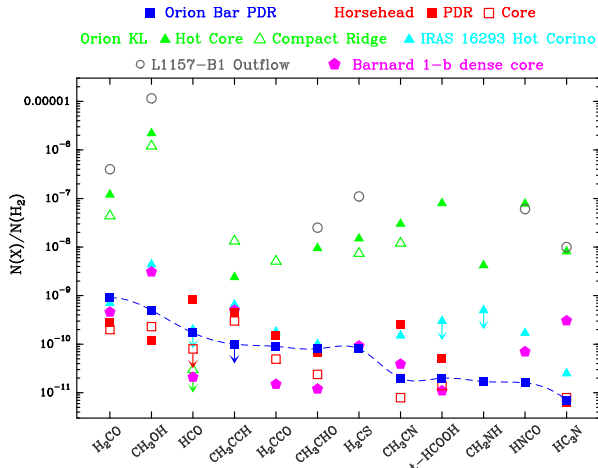


Fig. 19. Molecular abundances with respect to H_2 in several sources. In the Orion Bar PDR, blue points represent the molecular abundance assuming uniform beam filling.

Horsehead, dust grains are relatively cold even at the PDR edge ($T_d \lesssim 30$ K, Goicoechea et al. 2009). These dust temperatures are significantly below the sublimation temperatures of abundant interstellar ices (Gibb et al. 2000) such as H_2O (~ 100 K), CH_3OH (~ 100 K), and even H_2CO (~ 40 K). Hence, grains must be coated with mantles, even in the Horsehead PDR, and photodesorption can be efficient, either desorbing specific COMs or their gas-phase precursors (Guzmán et al. 2014). Indeed, PDR models adapted to the Horsehead and including grain surface reactions and ice photodesorption were invoked to explain the observed gas-phase CH_3OH and H_2CO abundances (Guzmán et al. 2013). In addition, the low H_2CO ortho-to-para ratio of two in the PDR (Guzmán et al. 2011) might support a cold surface origin for H_2CO . However, those Horsehead models required relatively high photodesorption yields (several 10^{-4} to 10^{-3} molecules per photon) that are apparently not supported by recent laboratory experiments of methanol photodesorption. In fact, little CH_3OH is actually seen to desorb in CH_3OH ice irradiation experiments (Bertin et al. 2016; Cruz-Díaz et al. 2016).

Also in the Horsehead, CH_3CN is 30 times more abundant in the PDR than in the shielded core (Gratier et al. 2013). CH_3CN is also an order of magnitude more abundant in the Horsehead than in the Orion Bar PDR. Given the high binding energy of CH_3CN ice (similar to CH_3OH , Collings et al. 2004) this result is quite surprising (methanol is more abundant than CH_3CN in the Bar). In addition, Gratier et al. (2013) detected CH_3NC towards the Horsehead PDR, with an isomeric ratio of $[CH_3NC]/[CH_3CN] = 0.15$, higher than our upper limit. These authors suggested that photodesorption triggers the CH_3CN abundance in the Horsehead. Therefore, photodesorption seems to enhance the gas-phase CH_3CN and CH_3NC abundances, but not that of CH_3OH . This suggests that photodesorption is a very selective process and thus, should be studied molecule by molecule in representative ISM ice analogs. In addition, gas phase reactions may allow the enhancement of CH_3CN with respect to CH_3OH .

In the Orion Bar, a much more strongly FUV-irradiated PDR, gas and dust grains are warmer (from $T_d \approx 40$ to 80 K; Arab et al. 2012). Thus, ice mantle abundances must be small close to the cloud edge. Interestingly, we find higher H_2CO and CH_3OH abundances in the Bar than in the Horsehead PDR (but not

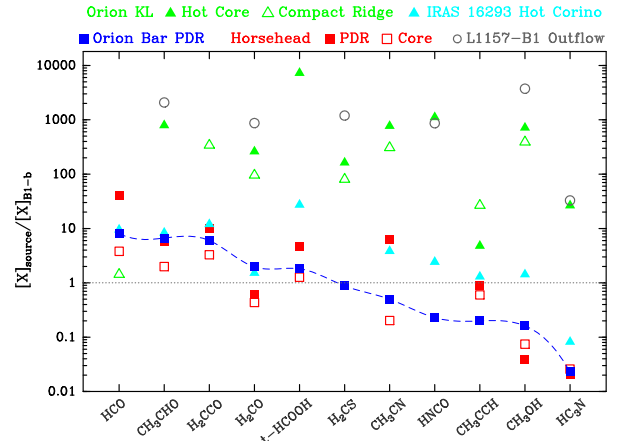


Fig. 20. Comparison of the abundance ratios with respect to B1-b in several sources.

HCO). In addition, H_2CO is detected close to the irradiated edge of the Orion Bar and we determine a H_2CO ortho-to-para ratio of approximately three (consistent with the high temperature limit). Finally, we determine a $HCO/H_2CO/CH_3OH \approx 1/5/3$ abundance ratio, whereas a $\sim 7/2/1$ ratio is found in the Horsehead PDR (Gerin et al. 2009; Guzmán et al. 2013). The ratios typically inferred in cold dense gas are $\sim 1/10/10$ (Bacmann & Faure 2016). Although HCO is approximately five times more abundant in the Horsehead, both PDRs show $[CH_3OH]/[H_2CO] < 1$ abundance ratios. We note that H_2CO is also a product of photodissociation of CH_3OH . In warm but FUV-shielded environments (hot cores and shocks), CH_3OH is much more abundant than in PDRs and cold cores.

6.2. Limits to steady-state PDR gas-phase chemistry

In order to explore the gas-phase production of HCO , H_2CO , and CH_3OH , we show PDR model results adapted to the illumination conditions in the Bar using the Meudon PDR code (e.g. Le Petit et al. 2006; Goicoechea & Le Bourlot 2007). This is a model of a high gas-pressure isobaric PDR with $\chi = 2 \times 10^4$ and $P_{th}/k = 10^8$ K cm $^{-3}$. Only H_2O , CO, and atoms are allowed to deplete from the gas following their adsorption energies (e.g. Hollenbach et al. 2009). However, we do not include surface chemistry (e.g. water ice only forms through water vapour freeze-out and desorbs thermally or by photodesorption; we refer to Cuadrado et al. 2015 for details). Figure 21 shows the abundance profiles as a function of cloud depth. Although the dust temperature is never low enough to allow CO ice-mantle formation, water ice starts to be very abundant at $A_V \gtrsim 5$ (a similar behaviour can be expected for CH_3OH ice). We note that the typical gas temperature inferred from our observations towards the line survey position ($T_k \approx 150$ K) corresponds to $A_V \approx 1.5 - 2.0$ mag and $T_d \approx 60$ K in this model. Hence, we expect mostly bare grains at the edge of the PDR, only coated with a few monolayers of very polar ices such as water (with high adsorption energies).

The model shown in Fig. 21 roughly reproduces the HCO abundance enhancement at the PDR edge (driven by reaction $O + CH_2 \rightarrow HCO + H$), but underpredicts the observed H_2CO and CH_3OH abundances. In these models, the H_2CO formation at $A_V \approx 1.5 - 2.0$ mag is largely dominated by reaction

$\text{O} + \text{CH}_3 \rightarrow \text{H}_2\text{CO} + \text{H}$. This comparison suggests either the gas-phase model misses important formation routes (or rates) in hot molecular gas, or that (nearly bare) grain surface formation and subsequent desorption is important. Esplugues et al. (2016) have shown PDR models including surface chemistry on grains with different ice content. In their models, chemical/reactive desorption (the surface reaction exothermicity is used to break the adsorbate-surface bond, e.g. Herbst 2015; Minissale et al. 2016), can dominate over photodesorption for some species (e.g. methanol). Nevertheless, the H_2CO and CH_3OH abundances predicted by Esplugues et al. (2016) in a PDR with high FUV fluxes are still lower than our observed values. Hence, at present, no model seems to reproduce the inferred abundances of molecules such as H_2CO and CH_3OH towards the Bar.

All these models, however, simulate a static PDR in which steady-state has been reached. A real PDR is likely to be more dynamic (Goicoechea et al. 2016). Time-dependent flows of molecular gas and icy grains might advect from inside the cold molecular cloud to the warm PDR edge. There they can be reprocessed by the combination of high temperatures and the presence of a strong FUV photon flux for some time before photodissociation. Thus, time-dependent desorption and advection of COMs (or gas-phase precursors) from the molecular cloud interior to the PDR may contribute to enhance their abundances.

The non-detection of HDCO at the illuminated edge of the Bar ($[\text{HDCO}]/[\text{H}_2\text{CO}] < 3 \times 10^{-3}$), and also in the Horsehead PDR (Guzmán et al. 2011), shows that pure gas-phase H_2CO deuteration is not efficient at high gas temperatures. However, HDCO has been detected towards the lukewarm ($T_k \lesssim 70$ K), dense and more FUV-shielded clump #3 by Parise et al. (2009). This agrees with specific chemical models in which pure gas-phase deuteration is efficient in gas below $T_k \lesssim 70$ K (Roueff et al. 2007). Time-dependent gas-phase models show that the $[\text{HDCO}]/[\text{H}_2\text{CO}]$ abundance ratio is particularly low at early cloud times (Treviño-Morales et al. 2014). In hot cores where high abundances of COMs have been detected, the gas deuteration is very high as well. Both effects are related to the sublimation of ice mantles formed and deuterated in a previous cold cloud stage. In the context of a dynamic PDR, deuterated species could desorb from grain surfaces and advect to the PDR edge as well. The very low $[\text{HDCO}]/[\text{H}_2\text{CO}]$ upper limit abundance towards the edge of the Bar suggests that this mechanism is not efficient for deuterated molecules, and that the gas temperature is too high to enhance the deuterium fractionation by pure gas-phase reactions alone.

6.3. CH_3CCH non detection

CH_3CCH is a widespread hydrocarbon present in the Horsehead PDR ($\sim 4.4 \times 10^{-10}$) and cold core ($\sim 3 \times 10^{-10}$), the extended ridge of Orion KL ($\sim 1 \times 10^{-8}$), the hot corino IRAS 16293-2422 ($\sim 7 \times 10^{-10}$), the Monoceros R2 ultra-compact H II region ($\sim 2 \times 10^{-9}$; Ginard et al. 2012), and even the nucleus of the starburst galaxy M82 ($\sim 1 \times 10^{-8}$; Fuente et al. 2005; Aladro et al. 2011). Unexpectedly, CH_3CCH lines are not bright towards the Bar edge. A few 2σ line features seen in the 1 mm range coincide with the expected frequencies of CH_3CCH . However, the detection cannot be confirmed with confidence at the sensitivity level of our line survey. Based on the tentative 2σ features, we estimate an upper limit abundance of $[\text{CH}_3\text{CCH}] < (0.8 - 1.3) \times 10^{-10}$. The unattenuated CH_3CCH photodissociation rate is high (several 10^{-9} s^{-1} for $\chi = 1$) and CH_3CCH reacts with C^+ ions relatively fast (e.g. Wakelam et al. 2012). Both the FUV photon flux and the C^+ column density

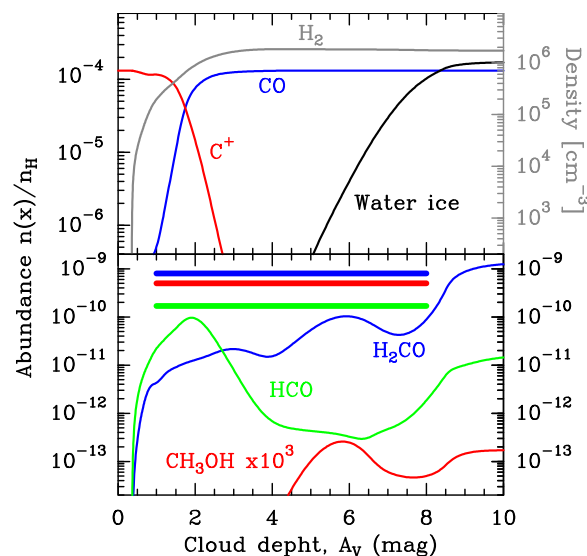


Fig. 21. Isobaric PDR model for the Orion Bar with $P_{\text{th}}/k = 10^8 \text{ K cm}^{-3}$ and $\chi = 2 \times 10^4$. The thick horizontal bars show the inferred abundances of HCO, H_2CO , and CH_3OH towards the PDR edge. In this model, these molecules are formed only through gas-phase reactions.

are particularly high towards the observed position at the edge of the Bar (Ossenkopf et al. 2013; Goicoechea et al. 2015). This combination likely explains the reduced CH_3CCH abundance. Indeed, in our PDR models, CH_3CCH only reaches detectable abundances at $A_V > 8$ (Cuadrado et al. 2015).

7. Summary and conclusions

We have investigated the presence and abundance of complex organic molecules in the strongly FUV-irradiated edge of the Orion Bar PDR, near the H_2 dissociation front. We used the IRAM 30 m telescope to carry out a millimetre line survey, complemented with $8.5''$ resolution maps of the molecular line emission at 0.9 mm. Despite being a very harsh environment, our observations show a relatively rich spectrum, with more than 250 lines arising from COMs and related organic precursors with up to seven atoms: H_2CO , CH_3OH , HCO, H_2CCO , CH_3CHO , H_2CS , HCOOH , CH_3CN , CH_2NH , HNCO , H_2^{13}CO , and HC_3N (in decreasing order of abundance). In particular, we obtained the following results:

- The abundance of the detected species range from 10^{-9} to 10^{-11} ; H_2CO being the most abundant. The inferred rotational temperatures range from ~ 10 to ~ 55 K, significantly lower than the gas temperature and thus consistent with sub-thermal excitation. H_2^{13}CO and H_2CCO have the lowest and the highest rotational temperatures, respectively. We obtain similar rotational temperatures for the ortho-para and A-E species, and ortho-to-para ratios of approximately three.
- For some molecules, we constrain the beam-averaged physical conditions from LVG excitation models. As shown by previous works (e.g. Leurini et al. 2006, 2010), we conclude that not all COMs arise from the same PDR layer. In particular, while CH_3OH only arises from dense gas in the more shielded PDR interior ($T_k = 40 - 50$ K), CH_3CN and H_2CO also trace warmer gas layers ($T_k = 150 - 250$ K), more exposed to a strong FUV-field.

- We determine a $\text{HCO}/\text{H}_2\text{CO}/\text{CH}_3\text{OH} \approx 1/5/3$ abundance ratio. Such relative abundances are not inferred in environments dominated by ice-mantle thermal desorption or grain sputtering. Overall, pure gas-phase models have difficulty reproducing the observed H_2CO and especially CH_3OH abundances in PDRs. Taking into account the elevated gas and dust temperatures at the edge of the Bar ($T_d \approx 60$ K), we suggest the following scenarios for the formation of COMs: (i) hot gas reactions not included in current models; (ii) COMs are produced in the warm grain surfaces of nearly bare grains; or (iii) the PDR dynamics is such that COMs or specific precursors formed in cold icy grains deeper inside the molecular cloud desorb and advect into the PDR.

The presence of COMs in the interstellar medium is more widespread than initially expected. It includes very harsh environments such as shocked gas and now strongly FUV-irradiated gas. COM formation reflects the complicated interplay between gas and grain surface chemistry in different environments. However, the specific formation pathways are not fully clear and may even not be the same in different environments. More laboratory experiments to study different grain surface processes and to investigate the products and rates of different desorption mechanisms (photodesorption, sublimation, chemical desorption, etc.) are needed to distinguish between the different possible scenarios. The census of increasingly complex organic molecule detections will obviously increase in the years to come.

Acknowledgements. We thank our referee for pointing us towards several missing references in an earlier version of the manuscript. We thank Nuria Marcelino for sharing the column densities of different COMs inferred towards Barnard 1-b. We are very grateful to the IRAM staff for their help during the observations. This work has been partially funded by MINECO grants (CSD2009-00038 and AYA2012-32032). We thank the ERC for support under grant ERC-2013-SyG-610256-NANOCOSMOS.

References

- Agúndez, M., Cernicharo, J., & Goicoechea, J. R. 2008, *A&A*, 483, 831
- Aladro, R., Martín, S., Martín-Pintado, J., et al. 2011, *A&A*, 535, A84
- Allegrini, M., Johns, J. W. C., & McKellar, A. R. W. 1979, *The Journal of Chemical Physics*, 70, 2829
- Andree-Labsch, S., Ossenkopf-Okada, V., & Röllig, M. 2017, *A&A*, 598, A2
- Anttila, R., Horneman, V. M., Koivusaari, M., & Paso, R. 1993, *Journal of Molecular Spectroscopy*, 157, 198
- Arab, H., Abergel, A., Habart, E., et al. 2012, *A&A*, 541, A19
- Austin, J. A., Levy, D. H., Gottlieb, C. A., & Radford, H. E. 1974, *J. Chem. Phys.*, 60, 207
- Avery, L. W., Broten, N. W., MacLeod, J. M., Oka, T., & Kroto, H. W. 1976, *ApJ*, 205, L173
- Bachiller, R., & Pérez Gutiérrez, M. 1997, *ApJ*, 487, L93
- Bacmann, A. & Faure, A. 2016, *ArXiv e-prints*
- Bacmann, A., Taquet, V., Faure, A., Kahane, C., & Ceccarelli, C. 2012, *A&A*, 541, L12
- Batrla, W. & Wilson, T. L. 2003, *A&A*, 408, 231
- Beers, Y., Klein, G. P., Kirchhoff, W. H., & Johnson, D. R. 1972, *Journal of Molecular Spectroscopy*, 44, 553
- Belloche, A., Garrod, R. T., Müller, H. S. P., & Menten, K. M. 2014, *Science*, 345, 1584
- Belloche, A., Garrod, R. T., Müller, H. S. P., et al. 2009, *A&A*, 499, 215
- Bertin, M., Romanzin, C., Doronin, M., et al. 2016, *ApJ*, 817, L12
- Bisschop, S. E., Jørgensen, J. K., van Dishoeck, E. F., & de Wachter, E. B. M. 2007, *A&A*, 465, 913
- Blake, G. A., Sastry, K. V. L. N., & de Lucia, F. C. 1984, *J. Chem. Phys.*, 80, 95
- Blake, G. A., Sutton, E. C., Masson, C. R., & Phillips, T. G. 1987, *ApJ*, 315, 621
- Bockelée-Morvan, D., Crovisier, J., Mumma, M. J., & Weaver, H. A. 2004, *The composition of cometary volatiles. Comets II* (University of Arizona Press), 391–423
- Bocquet, R., Demaison, J., Poteau, L., et al. 1996, *Journal of Molecular Spectroscopy*, 177, 154
- Bottinelli, S., Ceccarelli, C., Lefloch, B., et al. 2004, *ApJ*, 615, 354
- Boucher, D., Burie, J., Demaison, J., et al. 1977, *Journal of Molecular Spectroscopy*, 64, 290
- Bowater, I. C., Brown, J. M., & Carrington, A. 1971, *J. Chem. Phys.*, 54, 4957
- Brown, R. D., Crofts, J. G., Godfrey, P. D., et al. 1975, *ApJ*, 197, L29
- Brown, R. D., Godfrey, P. D., McNaughton, D., Pierlot, A. P., & Taylor, W. H. 1990, *Journal of Molecular Spectroscopy*, 140, 340
- Brünken, S., Müller, H. S. P., Lewen, F., & Winnewisser, G. 2003, *Physical Chemistry Chemical Physics (Incorporating Faraday Transactions)*, 5
- Burton, M. G., Hollenbach, D. J., & Tielens, A. G. G. M. 1990, *ApJ*, 365, 620
- Caselli, P. & Ceccarelli, C. 2012, *A&A Rev.*, 20, 56
- Cazaux, S., Tielens, A. G. G. M., Ceccarelli, C., et al. 2003, *ApJ*, 593, L51
- Cazzoli, G. & Pizzarini, C. 2006, *Journal of Molecular Spectroscopy*, 240, 153
- Cernicharo, J. 2012, in *EAS Publications Series*, Vol. 58, EAS Publications Series, 251–261
- Cernicharo, J., Bachiller, R., & Duvert, G. 1986, *A&A*, 160, 181
- Cernicharo, J., Guélin, M., & Kahane, C. 2000, *A&AS*, 142, 181
- Cernicharo, J., Heras, A. M., Tielens, A. G. G. M., et al. 2001, *ApJ*, 546, L123
- Cernicharo, J., Kisiel, Z., Tercero, B., et al. 2016, *A&A*, 587, L4
- Cernicharo, J., Marcelino, N., Roueff, E., et al. 2012, *ApJ*, 759, L43
- Chen, W., Bocquet, R., Włodarczyk, G., & Boucher, D. 1991, *International Journal of Infrared and Millimeter Waves*, 12, 987
- Codella, C., Fontani, F., Ceccarelli, C., et al. 2015, *MNRAS*, 449, L11
- Collings, M. P., Anderson, M. A., Chen, R., et al. 2004, *MNRAS*, 354, 1133
- Creswell, R. A., Winnewisser, G., & Gerry, M. C. L. 1977, *Journal of Molecular Spectroscopy*, 65, 420
- Crockett, N. R., Bergin, E. A., Neill, J. L., et al. 2014, *ApJ*, 787, 112
- Cronin, J. R. & Chang, S. 1993, in *NATO Advanced Science Institutes (ASI) Series C*, Vol. 416, NATO Advanced Science Institutes (ASI) Series C, ed. J. M. Greenberg, C. X. Mendoza-Gómez, & V. Pirronello, 209–258
- Cruz-Díaz, G. A., Martín-Doménech, R., Muñoz Caro, G. M., & Chen, Y.-J. 2016, *ArXiv e-prints*
- Cuadrado, S., Goicoechea, J. R., Pilleri, P., et al. 2015, *A&A*, 575, A82
- Cuadrado, S., Goicoechea, J. R., Roncero, O., et al. 2016, *A&A*, 596, L1
- de Zafra, R. L. 1971, *ApJ*, 170, 165
- DeLeon, R. L. & Muentner, J. S. 1985, *J. Chem. Phys.*, 82, 1702
- Dickinson, D. F. 1972, *Astrophys. Lett.*, 12, 235
- Dore, L., Bizzocchi, L., & Degli Esposti, C. 2012, *A&A*, 544, A19
- Dore, L., Bizzocchi, L., Degli Esposti, C., & Gauss, J. 2010, *Journal of Molecular Spectroscopy*, 263, 44
- Draine, B. T., Roberge, W. G., & Dalgarno, A. 1983, *ApJ*, 264, 485
- Eliet, S., Cuisset, A., Guinet, M., et al. 2012, *Journal of Molecular Spectroscopy*, 279, 12
- Esplugues, G. B., Cazaux, S., Meijerink, R., Spaans, M., & Caselli, P. 2016, *A&A*, 591, A52
- Fabricant, B., Krieger, D., & Muentner, J. S. 1977, *J. Chem. Phys.*, 67, 1576
- Fuente, A., García-Burillo, S., Gerin, M., et al. 2005, *ApJ*, 619, L155
- Fuente, A., García-Burillo, S., Usero, A., et al. 2008, *A&A*, 492, 675
- Gadhi, J., Lahrouni, A., Legrand, J., & Demaison, J. 1995, *Journal de chimie physique*, 92, 1984
- Gerin, M., Goicoechea, J. R., Pety, J., & Hily-Blant, P. 2009, *A&A*, 494, 977
- Gibb, E. L., Whittet, D. C. B., Schutte, W. A., et al. 2000, *ApJ*, 536, 347
- Ginard, D., González-García, M., Fuente, A., et al. 2012, *A&A*, 543, A27
- Goicoechea, J. R., Compiègne, M., & Habart, E. 2009, *ApJ*, 699, L165
- Goicoechea, J. R., Cuadrado, S., Pety, J., & et al. 2017, *A&A*, 601, L9
- Goicoechea, J. R., Joblin, C., Contursi, A., et al. 2011, *A&A*, 530, L16
- Goicoechea, J. R. & Le Bourlot, J. 2007, *A&A*, 467, 1
- Goicoechea, J. R., Pety, J., Cuadrado, S., et al. 2016, *Nature*, 537, 207
- Goicoechea, J. R., Teyssier, D., Etxaluze, M., et al. 2015, *ApJ*, 812, 75
- Goldsmith, P. F. & Langer, W. D. 1999, *ApJ*, 517, 209
- Gottlieb, C. A. 1973, in *Molecules in the Galactic Environment*, ed. M. A. Gordon & L. E. Snyder, 181
- Gratier, P., Pety, J., Guzmán, V., et al. 2013, *A&A*, 557, A101
- Green, S. 1986, *ApJ*, 309, 331
- Green, S. 1991, *ApJS*, 76, 979
- Greve, A., Kramer, C., & Wild, W. 1998, *A&AS*, 133, 271
- Guzmán, V., Pety, J., Goicoechea, J. R., Gerin, M., & Roueff, E. 2011, *A&A*, 534, A49
- Guzmán, V. V., Goicoechea, J. R., Pety, J., et al. 2013, *A&A*, 560, A73
- Guzmán, V. V., Pety, J., Goicoechea, J. R., et al. 2015, *ApJ*, 800, L33
- Guzmán, V. V., Pety, J., Gratier, P., et al. 2014, *Faraday Discussions*, 168, 103
- Habart, E., Dartois, E., Abergel, A., et al. 2010, *A&A*, 518, L116
- Herbst, E. 2015, in *European Physical Journal Web of Conferences*, Vol. 84, European Physical Journal Web of Conferences, 06002
- Herbst, E. & van Dishoeck, E. F. 2009, *ARA&A*, 47, 427
- Hirano, N., Kamazaki, T., Mikami, H., Ohashi, N., & Umemoto, T. 1999, in *Star Formation 1999*, ed. T. Nakamoto, 181–182
- Hocking, W. H., Gerry, M. C. L., & Winnewisser, G. 1975, *Canadian Journal of Physics*, 53, 1869

- Hogerheijde, M. R., Jansen, D. J., & van Dishoeck, E. F. 1995, *A&A*, 294, 792
- Hollenbach, D., Kaufman, M. J., Bergin, E. A., & Melnick, G. J. 2009, *ApJ*, 690, 1497
- Ikeda, M., Ohishi, M., Nummelin, A., et al. 2001, *ApJ*, 560, 792
- Jansen, D. J., Spaans, M., Hogerheijde, M. R., & van Dishoeck, E. F. 1995, *A&A*, 303, 541
- Johns, J. W. C., Nemes, L., Yamada, K. M. T., et al. 1992, *Journal of Molecular Spectroscopy*, 156, 501
- Johnson, D. R., Powell, F. X., & Kirchhoff, W. H. 1971, *Journal of Molecular Spectroscopy*, 39, 136
- Johnson, H. R. & Strandberg, M. W. P. 1952, *J. Chem. Phys.*, 20, 687
- Kirchhoff, W. H., Johnson, D. R., & Lovas, F. J. 1973, *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, 2, 1
- Kleiner, I., Lovas, F. J., & Godefroid, M. 1996, *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, 25, 1113
- Kukolich, S., Nelson, A., & Yamanashi, B. 1971, *Journal of the American Chemical Society*, 93, 6769
- Kukolich, S. G. 1982, *J. Chem. Phys.*, 76, 97
- Kukolich, S. G., Ruben, D. J., Wang, J. H. S., & Williams, J. R. 1973, *J. Chem. Phys.*, 58, 3155
- Langer, W. D. & Penzias, A. A. 1990, *ApJ*, 357, 477
- Lapinov, A. V., Golubiatnikov, G. Y., Markov, V. N., & Guarnieri, A. 2007, *Astronomy Letters*, 33, 121
- Le Petit, F., Nehmé, C., Le Bourlot, J., & Roueff, E. 2006, *ApJS*, 164, 506
- Lees, R. M. & Baker, J. G. 1968, *J. Chem. Phys.*, 48, 5299
- Lees, R. M., Lovas, F. J., Kirchhoff, W. H., & Johnson, D. R. 1973, *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, 2, 205
- Laurini, S., Parise, B., Schilke, P., Pety, J., & Rolfs, R. 2010, *A&A*, 511, A82
- Laurini, S., Rolfs, R., Thorwirth, S., et al. 2006, *A&A*, 454, L47
- Lis, D. C., Roueff, E., Gerin, M., et al. 2002, *ApJ*, 571, L55
- Lis, D. C. & Schilke, P. 2003, *ApJ*, 597, L145
- Liszt, H. S., Lucas, R., & Pety, J. 2006, *A&A*, 448, 253
- Maeda, A., Medvedev, I. R., Winnewisser, M., et al. 2008, *ApJS*, 176, 543
- Marcelino, N., Cernicharo, J., Roueff, E., Gerin, M., & Mauersberger, R. 2005, *ApJ*, 620, 308
- Marcelino, N., Cernicharo, J., Tercero, B., & Roueff, E. 2009, *ApJ*, 690, L27
- Marconi, A., Testi, L., Natta, A., & Walmsley, C. M. 1998, *A&A*, 330, 696
- Mbosele, L., Fayt, A., Dréan, P., & Cosléou, J. 2000, *Journal of Molecular Structure*, 517, 271
- Meier, D. S. & Turner, J. L. 2005, *ApJ*, 618, 259
- Meier, D. S. & Turner, J. L. 2012, *ApJ*, 755, 104
- Mendoza, E., Lefloch, B., López-Sepulcre, A., et al. 2014, *MNRAS*, 445, 151
- Menten, K. M., Reid, M. J., Forbrich, J., & Brunthaler, A. 2007, *A&A*, 474, 515
- Minissale, M., Moudens, A., Baouche, S., Chaabouni, H., & Dulieu, F. 2016, *MNRAS*, 458, 2953
- Müller, H. S. P., Drouin, B. J., & Pearson, J. C. 2009, *A&A*, 506, 1487
- Müller, H. S. P., Gendriesch, R., Margulès, L., et al. 2000, *Physical Chemistry Chemical Physics (Incorporating Faraday Transactions)*, 2
- Müller, H. S. P., Schlöder, F., Stutzki, J., & Winnewisser, G. 2005, *Journal of Molecular Structure*, 742, 215
- Müller, H. S. P., Thorwirth, S., Roth, D. A., & Winnewisser, G. 2001, *A&A*, 370, L49
- Nagy, Z., Choi, Y., Ossenkopf-Okada, V., et al. 2017, *A&A*, 599, A22
- Nagy, Z., Van der Tak, F. F. S., Ossenkopf, V., et al. 2013, *A&A*, 550, A96
- Öberg, K. I., Bottinelli, S., Jørgensen, J. K., & van Dishoeck, E. F. 2010, *ApJ*, 716, 825
- Ossenkopf, V., Röllig, M., Neufeld, D. A., et al. 2013, *A&A*, 550, A57
- Parise, B., Laurini, S., Schilke, P., et al. 2009, *A&A*, 508, 737
- Parmar, P. S., Lacy, J. H., & Achtermann, J. M. 1991, *ApJ*, 372, L25
- Pavone, F. S., Zink, L. R., Prevedelli, M., Inguscio, M., & Fusina, L. 1990, *Journal of Molecular Spectroscopy*, 144, 45
- Pickett, H. M., Poynter, R. L., Cohen, E. A., et al. 1998, *J. Quant. Spec. Radiat. Transf.*, 60, 883
- Rabli, D. & Flower, D. R. 2010, *MNRAS*, 406, 95
- Remijan, A. J., Hollis, J. M., Snyder, L. E., Jewell, P. R., & Lovas, F. J. 2006, *ApJ*, 643, L37
- Requena-Torres, M. A., Martín-Pintado, J., Rodríguez-Franco, A., et al. 2006, *A&A*, 455, 971
- Roueff, E., Parise, B., & Herbst, E. 2007, *A&A*, 464, 245
- Saito, S. 1972, *ApJ*, 178, L95
- Sastry, K. V. L. N., Lees, R. M., & Van der Linde, J. 1981, *Journal of Molecular Spectroscopy*, 88, 228
- Schilke, P., Pineau des Forêts, G., Walmsley, C. M., & Martín-Pintado, J. 2001, *A&A*, 372, 291
- Simon, R., Stutzki, J., Sternberg, A., & Winnewisser, G. 1997, *A&A*, 327, L9
- Snyder, L. E., Buhl, D., Zuckerman, B., & Palmer, P. 1969, *Physical Review Letters*, 22, 679
- Stoerzer, H., Stutzki, J., & Sternberg, A. 1995, *A&A*, 296, L9
- Tercero, B., Cernicharo, J., López, A., et al. 2015, *A&A*, 582, L1
- Tercero, B., Cernicharo, J., Pardo, J. R., & Goicoechea, J. R. 2010, *A&A*, 517, A96
- Tercero, B., Kleiner, I., Cernicharo, J., et al. 2013, *ApJ*, 770, L13
- Thorwirth, S., Müller, H. S. P., & Winnewisser, G. 2000, *Journal of Molecular Spectroscopy*, 204, 133
- Tielens, A. G. G. M. & Hollenbach, D. 1985a, *ApJ*, 291, 747
- Tielens, A. G. G. M. & Hollenbach, D. 1985b, *ApJ*, 291, 722
- Tielens, A. G. G. M., Meixner, M. M., van der Werf, P. P., et al. 1993, *Science*, 262, 86
- Treviño-Morales, S. P., Pilleri, P., Fuente, A., et al. 2014, *A&A*, 569, A19
- Turner, B. E. 1971, *ApJ*, 163, L35
- Šimečková, M., Urban, Š., Fuchs, U., et al. 2004, *Journal of Molecular Spectroscopy*, 226, 123
- van der Tak, F. F. S., Nagy, Z., Ossenkopf, V., et al. 2013, *A&A*, 560, A95
- van der Werf, P. P., Goss, W. M., & O'Dell, C. R. 2013, *ApJ*, 762, 101
- van der Werf, P. P., Stutzki, J., Sternberg, A., & Krabbe, A. 1996, *A&A*, 313, 633
- van der Wiel, M. H. D., van der Tak, F. F. S., Ossenkopf, V., et al. 2009, *A&A*, 498, 161
- van Dishoeck, E. F., Blake, G. A., Jansen, D. J., & Groesbeck, T. D. 1995, *ApJ*, 447, 760
- Wakelam, V., Herbst, E., Loison, J.-C., et al. 2012, *ApJS*, 199, 21
- Walmsley, C. M., Natta, A., Oliva, E., & Testi, L. 2000, *A&A*, 364, 301
- Wernli, M., Wiesenfeld, L., Faure, A., & Valiron, P. 2007, *A&A*, 464, 1147
- Wilson, T. L. & Rood, R. 1994, *ARA&A*, 32, 191
- Xu, L.-H., Fisher, J., Lees, R. M., et al. 2008, *Journal of Molecular Spectroscopy*, 251, 305
- Yamada, K. M. T., Moravec, A., & Winnewisser, G. 1995, *Zeitschrift Naturforschung Teil A*, 50, 1179
- Young Owl, R. C., Meixner, M. M., Wolfire, M., Tielens, A. G. G. M., & Tauber, J. 2000, *ApJ*, 540, 886
- Ziurys, L. M. & McGonagle, D. 1993, *ApJS*, 89, 155

Appendix A: Possible line emission contamination from the telescope side lobes

In order to determine whether or not the emission from the bright Orion BN/KL region contributes to our detected signal, we compared the 1 mm spectrum of the Orion Bar with that of Orion BN/KL (located at $\sim 2'$ north of the Bar, e.g. Tercero et al. 2010). Figure A.1 shows several H_2CS and CH_3OH lines observed towards the Bar (black histogram) and Orion BN/KL (red histogram; see Tercero et al. 2010, 2015). We note that the amplitude of Orion BN/KL spectra are divided by a given value to match the line intensities from the Bar. This comparison shows that while the line emission from the Orion Bar peaks at $v_{\text{LSR}} \approx 10.7 \text{ km s}^{-1}$, and can be fully attributed to gas in the PDR (Goicoechea et al. 2016), the blue-shifted shoulder emission seen in some lines at $\sim 8 \text{ km s}^{-1}$ is likely produced by the intense emission from Orion BN/KL, and perhaps by the extended Orion cloud component (for the low-excitation lines). This emission is detected through the telescope extended side lobes and results in a blue-shifted emission shoulder in some spectra towards the Bar. For the IRAM 30 m telescope, the contribution of the secondary lobes increases with frequency (Greve et al. 1998). Given the specific emission velocity and narrow line widths of the emission from the Bar, and the fact that this effect is stronger at $\sim 1 \text{ mm}$, we conclude that our line assignments and line intensity extraction in the PDR is correct.

Appendix B: Identified lines of complex organic molecules

A summary of the main line spectroscopic parameters is presented in Tables B.1-B.11. Line frequency (in MHz), energy of the upper level of each transition (E_u/k in K), Einstein coefficient for spontaneous emission (A_{ul} in s^{-1}), intrinsic line strength (S_{ul}), and the level degeneracy (g_u) from MADEX spectral catalogue, and JPL and CDMS molecular databases are shown. The velocity-integrated line intensity ($\int T_{\text{MB}} dv$ in mK km s^{-1}), LSR velocity (v_{LSR} in km s^{-1}), FWHM line width (Δv in km s^{-1}), and the line peak temperature (T_{MB} in mK) were obtained from Gaussian fits. Parentheses indicate the uncertainty. When two or more transitions were found to overlap, the total profile was fitted. Fully overlapping transitions are marked with connecting symbols in the tables.

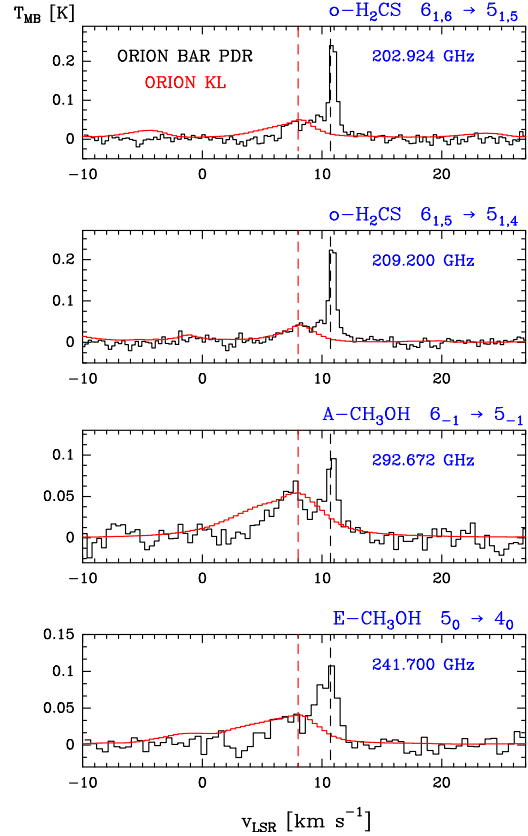


Fig. A.1. Orion Bar spectra (black) at different frequencies in the 1 mm range. For each line, the spectrum towards Orion BN/KL is also shown in red (Tercero et al. 2010, 2015). The CH_3OH spectra towards Orion BN/KL have been divided by ~ 400 , and the H_2CS spectra by ~ 200 . The black and red dashed lines indicate the LSR velocity of the Orion Bar PDR (10.7 km s^{-1}) and Orion extended ridge and/or south hot core ($\sim 8 \text{ km s}^{-1}$, see e.g. Cernicharo et al. 2016), respectively.

S. Cuadrado et al.: Complex organic molecules in strongly UV-irradiated gas

Table B.1. Line parameters of HCO.

Transition (N_{K_a,K_c}, J, F) _u → (N_{K_a,K_c}, J, F) _l	Frequency [MHz]	E_u/k [K]	A_{ul} [s ⁻¹]	S_{ul}	g_u	$\int T_{MB} dv$ [mK km s ⁻¹]	v_{LSR} [km s ⁻¹]	Δv [km s ⁻¹]	T_{MB} [mK]	S/N
1 _{0,1} , 3/2, 2 → 0 _{0,0} , 1/2, 1	86670.760 ^F	4.2	4.68×10^{-6}	1.66	5	497(12)	10.5(<0.1)	3.1(0.1)	149	52
1 _{0,1} , 3/2, 1 → 0 _{0,0} , 1/2, 0	86708.360 ^F	4.2	4.59×10^{-6}	0.98	3	286(7)	10.5(<0.1)	2.8(0.1)	95	33
1 _{0,1} , 1/2, 1 → 0 _{0,0} , 1/2, 1	86777.460 ^F	4.2	4.60×10^{-6}	0.98	3	294(7)	10.5(<0.1)	3.0(0.1)	92	32
1 _{0,1} , 1/2, 0 → 0 _{0,0} , 1/2, 1	86805.780 ^F	4.2	4.71×10^{-6}	0.33	1	75(6)	10.5(0.1)	2.3(0.2)	31	10
2 _{0,2} , 5/2, 3 → 1 _{0,1} , 3/2, 2	173377.377 ^W	12.5	4.50×10^{-5}	2.80	7	683(86)	—	—	—	8
2 _{0,2} , 5/2, 2 → 1 _{0,1} , 3/2, 1	173406.082 ^W	12.5	4.42×10^{-5}	1.96	5	346(70)	—	—	—	6
2 _{0,2} , 3/2, 2 → 1 _{0,1} , 1/2, 1	173443.065 ^W	12.5	3.38×10^{-5}	1.50	5	409(94)	—	—	—	5
2 _{0,2} , 3/2, 1 → 1 _{0,1} , 1/2, 0	173474.400 ^W	12.5	2.50×10^{-5}	0.66	3	185(79)	—	—	—	4
3 _{0,3} , 7/2, 4 → 2 _{0,2} , 5/2, 3	260060.329 ^F	25.0	1.63×10^{-4}	3.85	9	576(15)	10.5(<0.1)	2.0(0.1)	275	23
3 _{0,3} , 7/2, 3 → 2 _{0,2} , 5/2, 2	260082.192 ^F	25.0	1.60×10^{-4}	2.95	7	446(15)	10.5(<0.1)	2.0(0.1)	209	16
3 _{0,3} , 5/2, 3 → 2 _{0,2} , 3/2, 2	260133.586 ^F	25.0	1.45×10^{-4}	2.67	7	347(17)	10.6(<0.1)	1.7(0.4)	195	15
3 _{0,3} , 5/2, 2 → 2 _{0,2} , 3/2, 1	260155.769 ^W	25.0	1.37×10^{-4}	1.80	5	382(25)	—	—	—	19
4 _{0,4} , 9/2, 5 → 3 _{0,3} , 7/2, 4	346708.493 ^F	41.6	3.99×10^{-4}	4.88	11	437(38)	10.6(0.1)	2.6(0.3)	156	7
4 _{0,4} , 9/2, 4 → 3 _{0,3} , 7/2, 3	346725.172 ^F	41.6	3.95×10^{-4}	3.95	9	308(36)	10.6(0.1)	2.0(0.3)	142	7
4 _{0,4} , 7/2, 4 → 3 _{0,3} , 5/2, 3	346787.898 ^F	41.6	3.76×10^{-4}	3.76	9	362(41)	10.5(0.2)	3.0(0.5)	112	6
4 _{0,4} , 7/2, 3 → 3 _{0,3} , 5/2, 2	346804.597 ^F	41.6	3.67×10^{-4}	2.85	7	223(29)	10.6(0.1)	1.6(0.3)	127	7

Notes. Frequencies, E_u/k , A_{ul} , S_{ul} , and g_u from JPL catalogue. **Labels:** ^F Detected with FTS backend. ^W The lines detected with WILMA backend just give information about the integrated line intensity (see Cuadrado et al. 2015). * Symmetry (ortho-para or E-A).

Table B.2. Line parameters of H₂CO.

Transition (J_{K_a,K_c}) _u → (J_{K_a,K_c}) _l	Sym.*	Frequency [MHz]	E_u/k [K]	A_{ul} [s ⁻¹]	S_{ul}	g_u	$\int T_{MB} dv$ [mK km s ⁻¹]	v_{LSR} [km s ⁻¹]	Δv [km s ⁻¹]	T_{MB} [mK]	S/N
2 _{1,2} → 1 _{1,1}	<i>ortho</i>	140839.516 ^W	6.8	5.30×10^{-5}	1.5	5	13488(28)	—	—	—	423
2 _{0,2} → 1 _{0,1}	<i>para</i>	145602.951 ^W	10.5	7.80×10^{-5}	2.0	5	5611(67)	—	—	—	95
2 _{1,1} → 1 _{1,0}	<i>ortho</i>	150498.335 ^W	7.5	6.46×10^{-5}	1.5	5	10850(97)	—	—	—	208
3 _{1,3} → 2 _{1,2}	<i>ortho</i>	211211.449 ^F	16.9	2.27×10^{-4}	2.7	7	13732(26)	10.6(0.1)	2.3(0.1)	5519	338
3 _{0,3} → 2 _{0,2}	<i>para</i>	218222.187 ^F	21.0	2.81×10^{-4}	3.0	7	6567(22)	10.6(0.1)	2.2(0.1)	2771	311
3 _{2,2} → 2 _{2,1}	<i>para</i>	218475.634 ^F	68.1	1.57×10^{-4}	1.7	7	2600(9)	10.7(0.1)	2.1(0.1)	1148	175
3 _{2,1} → 2 _{2,0}	<i>para</i>	218760.062 ^F	68.1	1.58×10^{-4}	1.7	7	2582(12)	10.7(0.1)	2.1(0.1)	1145	151
3 _{1,2} → 2 _{1,1}	<i>ortho</i>	225697.772 ^F	18.3	2.77×10^{-4}	2.7	7	11382(39)	10.6(0.1)	2.4(0.1)	4537	269
4 _{1,4} → 3 _{1,3}	<i>ortho</i>	281526.919 ^F	30.4	5.87×10^{-4}	3.8	9	15275(49)	10.5(0.1)	2.4(0.1)	6032	409
4 _{2,3} → 3 _{2,2}	<i>para</i>	291237.765 ^F	82.1	5.20×10^{-4}	3.0	9	2870(19)	10.6(0.1)	2.1(0.1)	1266	100
4 _{3,2} → 3 _{3,1}	<i>ortho</i>	291380.441 ^F	125.8	3.04×10^{-4}	1.8	9	3815(19)	10.6(0.1)	2.0(0.1)	1755	138
4 _{3,1} → 3 _{3,0}	<i>ortho</i>	291384.360 ^F	125.8	3.04×10^{-4}	1.8	9	4282(21)	10.7(0.1)	2.3(0.1)	1744	138
4 _{2,2} → 3 _{2,1}	<i>para</i>	291948.066 ^F	82.1	5.24×10^{-4}	3.0	9	2863(19)	10.6(0.1)	2.2(0.1)	1244	101
4 _{1,3} → 3 _{1,2}	<i>ortho</i>	300836.630 ^F	32.7	7.17×10^{-4}	3.8	9	9897(49)	10.7(0.1)	2.5(0.1)	3668	135
5 _{1,5} → 4 _{1,4}	<i>ortho</i>	351768.637 ^F	47.3	1.20×10^{-3}	4.8	11	8551(88)	10.7(0.1)	2.4(0.1)	3294	61

Notes. Frequencies, E_u/k , A_{ul} , S_{ul} , and g_u from MADEX code, that fit to all rotational lines reported by Bocquet et al. (1996), Brünken et al. (2003), and Eliet et al. (2012).

S. Cuadrado et al.: Complex organic molecules in strongly UV-irradiated gas

Table B.3. Line parameters of H_2^{13}CO .

Transition	Sym.*	Frequency	E_u/k	A_{ul}	S_{ul}	g_u	$\int T_{\text{MB}} dv$	v_{LSR}	Δv	T_{MB}	S/N
$(J_{K_a, K_c})_u \rightarrow (J_{K_a, K_c})_l$		[MHz]	[K]	[s^{-1}]			[mK km s^{-1}]	[km s^{-1}]	[km s^{-1}]	[mK]	
$2_{1,2} \rightarrow 1_{1,1}$	<i>ortho</i>	137449.954 ^W	6.6	4.92×10^{-5}	1.5	5	298(53)	—	—	—	7
$2_{1,1} \rightarrow 1_{1,0}$	<i>ortho</i>	146635.669 ^W	7.3	5.98×10^{-5}	1.5	5	73(29)	—	—	—	5
$3_{1,3} \rightarrow 2_{1,2}$	<i>ortho</i>	206131.619 ^F	16.5	2.11×10^{-4}	2.6	7	251(12)	10.5(0.1)	2.4(0.1)	97	11
$3_{0,3} \rightarrow 2_{0,2}$	<i>para</i>	212811.190 ^F	20.4	2.61×10^{-4}	3.0	7	84(13)	10.3(0.1)	2.1(0.4)	37	4
$3_{1,2} \rightarrow 2_{1,1}$	<i>ortho</i>	219908.481 ^F	17.8	2.56×10^{-4}	2.7	7	151(12)	10.7(0.1)	2.0(0.2)	70	7
$4_{1,4} \rightarrow 3_{1,3}$	<i>ortho</i>	274762.103 ^F	29.7	5.46×10^{-4}	3.8	9	180(16)	10.8(0.1)	2.3(0.3)	74	6
$4_{0,4} \rightarrow 3_{0,3}$	<i>para</i>	283441.868 ^F	34.0	6.39×10^{-4}	4.0	9	32(13)	10.7(0.2)	0.9(0.5)	33	4
$4_{1,3} \rightarrow 3_{1,2}$	<i>ortho</i>	293126.495 ^F	31.9	6.63×10^{-4}	3.8	9	140(13)	10.5(0.1)	2.3(0.3)	58	6

Notes. Frequencies, E_u/k , A_{ul} , S_{ul} , and g_u from MADEX code, that fit to all rotational lines reported by Müller et al. (2000).**Table B.4.** Line parameters of H_2CS .

Transition	Sym.*	Frequency	E_u/k	A_{ul}	S_{ul}	g_u	$\int T_{\text{MB}} dv$	v_{LSR}	Δv	T_{MB}	S/N
$(J_{K_a, K_c})_u \rightarrow (J_{K_a, K_c})_l$		[MHz]	[K]	[s^{-1}]			[mK km s^{-1}]	[km s^{-1}]	[km s^{-1}]	[mK]	
$3_{1,3} \rightarrow 2_{1,2}$	<i>ortho</i>	101477.810 ^F	8.1	1.26×10^{-5}	2.67	7	79(8)	10.8(0.1)	1.1(0.1)	68	10
$3_{2,2} \rightarrow 2_{2,1}$	<i>para</i>	103039.907 ^F	62.6	8.25×10^{-6}	1.67	7	} 53(5)	10.9(0.1)	1.8(0.2)	28	9
$3_{0,3} \rightarrow 2_{0,2}$	<i>para</i>	103040.452 ^F	9.9	1.48×10^{-5}	3.00	7		10.5(0.3)	1.5(1.3)	10	3
$3_{2,1} \rightarrow 2_{2,0}$	<i>para</i>	103051.847 ^F	62.6	8.25×10^{-6}	1.67	7	19(7)	10.7(<0.1)	1.3(0.1)	59	14
$3_{1,2} \rightarrow 2_{1,1}$	<i>ortho</i>	104617.040 ^F	8.4	1.38×10^{-5}	2.67	7	85(5)	—	—	—	2
$4_{0,4} \rightarrow 3_{0,3}$	<i>para</i>	137371.210 ^W	16.5	3.65×10^{-5}	4.00	9	182(18)	—	—	—	4
$4_{1,3} \rightarrow 3_{1,2}$	<i>ortho</i>	139483.682 ^W	15.1	3.58×10^{-5}	3.75	9	149(22)	—	—	—	10
$5_{1,5} \rightarrow 4_{1,4}$	<i>ortho</i>	169114.079 ^W	22.7	6.68×10^{-5}	4.80	11	229(35)	—	—	—	9
$5_{0,5} \rightarrow 4_{0,4}$	<i>para</i>	171688.117 ^W	24.7	7.28×10^{-5}	5.00	11	1447(217)	—	—	—	3
$5_{1,4} \rightarrow 4_{1,3}$	<i>ortho</i>	174345.223 ^W	23.5	7.32×10^{-5}	4.80	11	300(106)	10.9(<0.1)	0.8(0.1)	245	18
$6_{1,6} \rightarrow 5_{1,5}$	<i>ortho</i>	202924.054 ^F	32.5	1.19×10^{-4}	5.83	13	206(10)	10.9(<0.1)	0.7(0.1)	104	10
$6_{0,6} \rightarrow 5_{0,5}$	<i>para</i>	205987.858 ^F	34.6	1.28×10^{-4}	6.00	13	75(7)	10.9(0.1)	1.3(0.4)	55	5
$6_{3,4} \rightarrow 5_{3,3}$	<i>ortho</i>	206052.602 ^F	138.3	9.59×10^{-5}	4.50	13	} 76(14)	10.9(0.1)	1.0(0.1)	47	5
$6_{3,3} \rightarrow 5_{3,2}$	<i>ortho</i>	206052.602 ^F	138.3	9.59×10^{-5}	4.50	13		10.9(<0.1)	0.8(0.1)	231	17
$6_{2,4} \rightarrow 5_{2,3}$	<i>para</i>	206158.602 ^F	87.3	1.14×10^{-4}	5.33	13	48(7)	10.9(<0.1)	0.5(0.1)	185	7
$6_{1,5} \rightarrow 5_{1,4}$	<i>ortho</i>	209200.620 ^F	33.5	1.30×10^{-4}	5.83	13	190(9)	10.8(<0.1)	0.9(0.1)	116	8
$7_{1,7} \rightarrow 6_{1,6}$	<i>ortho</i>	236727.020 ^F	43.8	1.92×10^{-4}	6.86	15	105(14)	10.8(0.1)	0.3(0.2)	76	3
$7_{0,7} \rightarrow 6_{0,6}$	<i>para</i>	240266.872 ^F	46.1	2.05×10^{-4}	7.00	15	107(13)	10.5(0.1)	1.6(0.2)	72	6
$7_{2,6} \rightarrow 6_{2,5}$	<i>para</i>	240382.051 ^F	98.8	1.88×10^{-4}	6.43	15	24(6)	10.7(0.1)	1.5(0.2)	54	5
$7_{3,5} \rightarrow 6_{3,4}$	<i>ortho</i>	240393.037 ^F	149.8	1.68×10^{-4}	5.71	15	} 122(14)	—	—	—	—
$7_{3,4} \rightarrow 6_{3,3}$	<i>ortho</i>	240393.762 ^F	149.8	1.68×10^{-4}	5.71	15		—	—	—	—
$7_{2,5} \rightarrow 6_{2,4}$	<i>para</i>	240549.066 ^F	98.8	1.89×10^{-4}	6.43	15	62(11)	—	—	—	—

S. Cuadrado et al.: Complex organic molecules in strongly UV-irradiated gas

Table B.4. continued.

Transition	Sym.*	Frequency	E_u/k	A_{ul}	S_{ul}	g_u	$\int T_{MB} dv$	v_{LSR}	Δv	T_{MB}	S/N
$(J_{K_a, K_c})_u \rightarrow (J_{K_a, K_c})_l$		[MHz]	[K]	[s ⁻¹]			[mK km s ⁻¹]	[km s ⁻¹]	[km s ⁻¹]	[mK]	
$7_{1,6} \rightarrow 6_{1,5}$	<i>ortho</i>	244048.504 ^F	45.2	2.10×10^{-4}	6.86	15	185(11)	10.9(<0.1)	0.8(0.1)	260	14
$8_{1,8} \rightarrow 7_{1,7}$	<i>ortho</i>	270521.931 ^F	56.8	2.90×10^{-4}	7.88	17	128(16)	10.8(0.1)	0.9(0.2)	139	6
$8_{0,8} \rightarrow 7_{0,7}$	<i>para</i>	274521.931 ^F	59.3	3.08×10^{-4}	8.00	17	60(9)	11.1(0.1)	0.7(0.1)	77	5
$8_{2,6} \rightarrow 7_{2,5}$	<i>para</i>	274953.744 ^F	112.0	2.90×10^{-4}	7.50	17	36(9)	11.0(0.1)	0.9(0.2)	39	3
$8_{1,7} \rightarrow 7_{1,6}$	<i>ortho</i>	278887.661 ^F	58.6	3.18×10^{-4}	7.87	17	195(13)	10.9(<0.1)	0.7(0.1)	245	14
$9_{1,9} \rightarrow 8_{1,8}$	<i>ortho</i>	304307.709 ^F	71.4	4.17×10^{-4}	8.89	19	75(8)	10.7(0.1)	0.7(0.1)	101	5
$10_{1,10} \rightarrow 9_{1,9}$	<i>ortho</i>	338083.195 ^F	87.6	5.77×10^{-4}	9.90	21	108(30)	10.6(0.1)	0.9(0.3)	113	3

Notes. Frequencies, E_u/k , A_{ul} , S_{ul} , and g_u from CDMS catalogue.**Table B.5.** Line parameters of HNCO.

Transition	Frequency	E_u/k	A_{ul}	S_{ul}	g_u	$\int T_{MB} dv$	v_{LSR}	Δv	T_{MB}	S/N
$(J_{K_a, K_c})_u \rightarrow (J_{K_a, K_c})_l$	[MHz]	[K]	[s ⁻¹]			[mK km s ⁻¹]	[km s ⁻¹]	[km s ⁻¹]	[mK]	
$4_{0,4} \rightarrow 3_{0,3}$	87925.237 ^F	10.5	9.03×10^{-6}	4.0	9	49(6)	10.8(0.1)	1.7(0.2)	27	8
$5_{0,5} \rightarrow 4_{0,4}$	109905.749 ^F	15.8	1.80×10^{-5}	5.0	11	110(9)	10.6(0.1)	1.9(0.2)	54	10
$7_{0,7} \rightarrow 6_{0,6}$	153865.086 ^W	29.5	5.08×10^{-5}	7.0	15	125(39)	—	—	—	3
$10_{0,10} \rightarrow 9_{0,9}$	219798.274 ^F	58.0	1.51×10^{-4}	10.0	21	154(16)	10.6(0.2)	3.3(0.4)	44	6
$11_{0,11} \rightarrow 10_{0,10}$	241774.032 ^F	69.6	2.02×10^{-4}	11.0	23	118(21)	10.7(0.1)	1.6(0.3)	69	5
$13_{0,13} \rightarrow 12_{0,12}$	285721.951 ^F	96.0	3.36×10^{-4}	13.0	27	129(26)	10.4(0.3)	2.8(0.7)	43	5

Notes. Frequencies, E_u/k , A_{ul} , S_{ul} , and g_u from CDMS catalogue.**Table B.6.** Line parameters of CH₂NH.

Transition	Frequency	E_u/k	A_{ul}	S_{ul}	g_u	$\int T_{MB} dv$	v_{LSR}	Δv	T_{MB}	S/N
$(J_{K_a, K_c})_u \rightarrow (J_{K_a, K_c})_l$	[MHz]	[K]	[s ⁻¹]			[mK km s ⁻¹]	[km s ⁻¹]	[km s ⁻¹]	[mK]	
$4_{0,4} \rightarrow 3_{1,3}$	105794.062 ^F	30.6	1.62×10^{-5}	5.0	9	55(13)	11.3(0.5)	4.2(1.3)	12	3
$1_{1,1} \rightarrow 0_{0,0}$	225554.609 ^F	10.8	2.79×10^{-4}	3.0	3	120(26)	10.5(0.2)	2.9(0.9)	39	4
$4_{1,4} \rightarrow 3_{1,3}$	245125.866 ^F	37.3	3.85×10^{-4}	11.2	9	106(14)	11.1(0.1)	2.3(0.4)	43	4
$6_{0,6} \rightarrow 5_{1,5}$	251421.265 ^F	64.1	2.73×10^{-4}	9.2	13	72(13)	11.0(0.3)	3.1(0.6)	22	4
$4_{0,4} \rightarrow 3_{0,3}$	254685.137 ^F	30.6	4.60×10^{-4}	12.0	9	314(12)	10.8(0.1)	2.0(0.1)	147	14
$4_{1,3} \rightarrow 3_{1,2}$	266270.024 ^F	39.8	4.93×10^{-4}	11.2	9	117(12)	10.9(0.1)	2.0(0.2)	54	5

Notes. Frequencies, E_u/k , A_{ul} , S_{ul} , and g_u from CDMS catalogue.

S. Cuadrado et al.: Complex organic molecules in strongly UV-irradiated gas

Table B.7. Line parameters of H₂CCO.

Transition ($J_{K_a,K_c})_u \rightarrow (J_{K_a,K_c})_l$	Sym.*	Frequency [MHz]	E_u/k [K]	A_{ul} [s ⁻¹]	S_{ul}	g_u	$\int T_{MB} dv$ [mK km s ⁻¹]	v_{LSR} [km s ⁻¹]	Δv [km s ⁻¹]	T_{MB} [mK]	S/N
4 _{2,3} → 3 _{2,2}	<i>para</i>	80820.400 ^F	61.9	4.14×10^{-6}	3.0	9	13(9)	10.9(0.7)	1.6(0.7)	8	2
4 _{1,3} → 3 _{1,2}	<i>ortho</i>	81586.239 ^F	8.8	5.33×10^{-6}	3.8	9	44(8)	11.0(0.3)	2.5(0.6)	13	4
5 _{1,5} → 4 _{1,4}	<i>ortho</i>	100094.511 ^F	13.5	1.03×10^{-5}	4.8	11	61(6)	10.4(0.2)	1.9(0.5)	30	3
5 _{3,3} → 4 _{3,2}	<i>ortho</i>	101002.349 ^F	117.9	7.06×10^{-6}	3.2	11	} 25(8)	10.3(0.2)	1.0(0.3)	25	3
5 _{3,2} → 4 _{3,1}	<i>ortho</i>	101002.354 ^F	117.9	7.06×10^{-6}	3.2	11					
5 _{2,4} → 4 _{2,3}	<i>para</i>	101024.430 ^F	66.7	9.27×10^{-6}	4.2	11	24(6)	10.2(0.2)	1.7(0.8)	15	2
5 _{1,4} → 4 _{1,3}	<i>ortho</i>	101981.442 ^F	13.7	1.09×10^{-5}	4.8	11	58(6)	10.9(0.1)	2.3(0.3)	24	7
7 _{1,7} → 6 _{1,6}	<i>ortho</i>	140127.471 ^W	25.9	2.96×10^{-5}	6.9	15	107(43)	—	—	—	5
7 _{3,5} → 6 _{3,4}	<i>ortho</i>	141402.460 ^W	130.5	2.54×10^{-5}	5.7	15	} 71(32)	—	—	—	4
7 _{3,4} → 6 _{3,3}	<i>ortho</i>	141402.491 ^W	130.5	2.54×10^{-5}	5.7	15					
8 _{1,7} → 7 _{1,6}	<i>ortho</i>	163160.893 ^W	34.3	4.74×10^{-5}	7.9	17	114(22)	—	—	—	5
11 _{1,11} → 10 _{1,10}	<i>ortho</i>	220177.558 ^F	62.4	1.19×10^{-4}	10.9	23	128(13)	10.8(0.1)	2.6(0.3)	47	5
11 _{3,9} → 10 _{3,8}	<i>ortho</i>	222199.879 ^F	167.4	1.14×10^{-4}	10.2	23	} 120(13)	10.5(0.1)	1.9(0.5)	59	8
11 _{3,8} → 10 _{3,7}	<i>ortho</i>	222200.199 ^F	167.4	1.14×10^{-4}	10.2	23					
11 _{2,10} → 10 _{2,9}	<i>para</i>	222228.629 ^F	116.2	1.20×10^{-4}	10.6	23	54(15)	10.7(0.1)	2.0(0.8)	25	4
11 _{1,10} → 10 _{1,9}	<i>ortho</i>	224327.246 ^F	63.6	1.26×10^{-4}	10.9	23	125(11)	10.8(0.1)	2.5(0.2)	47	7
12 _{1,12} → 11 _{1,11}	<i>ortho</i>	240185.798 ^F	74.0	1.56×10^{-4}	11.9	25	123(19)	10.9(0.2)	2.6(0.6)	45	5
12 _{0,12} → 11 _{0,11}	<i>para</i>	242375.721 ^F	75.6	1.61×10^{-4}	12.0	25	38(11)	10.5(0.1)	0.8(0.2)	46	2
12 _{1,11} → 11 _{1,10}	<i>ortho</i>	244712.254 ^F	75.4	1.64×10^{-4}	11.9	25	123(13)	10.8(0.1)	1.7(0.1)	69	5
13 _{1,13} → 12 _{1,12}	<i>ortho</i>	260191.993 ^W	86.5	1.99×10^{-4}	12.9	27	100(19)	—	—	—	7
13 _{0,13} → 12 _{0,12}	<i>para</i>	262548.202 ^F	88.2	2.05×10^{-4}	13.0	27	35(9)	10.8(0.1)	1.2(0.2)	28	3
13 _{3,11} → 12 _{3,10}	<i>ortho</i>	262596.638 ^F	191.6	1.94×10^{-4}	12.3	27	} 108(17)	10.7(0.1)	2.1(0.3)	46	5
13 _{3,10} → 12 _{3,9}	<i>ortho</i>	262597.384 ^F	191.6	1.94×10^{-4}	12.3	27					
13 _{2,12} → 12 _{2,11}	<i>para</i>	262618.994 ^F	140.4	2.00×10^{-4}	12.7	27	43(9)	10.7(0.2)	1.5(0.2)	27	3
13 _{2,11} → 12 _{2,10}	<i>para</i>	262760.857 ^F	140.5	2.01×10^{-4}	12.7	27	38(15)	10.3(0.3)	1.8(0.8)	20	3
13 _{1,12} → 12 _{1,11}	<i>ortho</i>	265095.061 ^F	88.1	2.10×10^{-4}	13.0	27	99(10)	10.7(0.1)	1.5(0.1)	63	6
14 _{1,14} → 13 _{1,13}	<i>ortho</i>	280195.979 ^F	99.9	2.49×10^{-4}	13.9	29	128(13)	10.6(0.1)	2.0(0.2)	61	6
14 _{0,14} → 13 _{0,13}	<i>para</i>	282714.584 ^F	101.8	2.57×10^{-4}	14.0	29	33(15)	10.8(0.3)	1.0(0.3)	31	3
14 _{3,12} → 13 _{3,11}	<i>ortho</i>	282794.399 ^F	205.2	2.45×10^{-4}	13.4	29	} 131(15)	10.5(0.1)	2.0(0.2)	62	6
14 _{3,11} → 13 _{3,10}	<i>ortho</i>	282795.485 ^F	205.2	2.45×10^{-4}	13.4	29					
14 _{2,13} → 13 _{2,12}	<i>para</i>	282811.466 ^F	154.0	2.52×10^{-4}	13.7	29	39(13)	10.5(0.1)	0.9(0.3)	45	4
14 _{2,12} → 13 _{2,11}	<i>para</i>	282988.739 ^F	154.0	2.52×10^{-4}	13.7	29	34(7)	10.7(0.1)	1.0(0.2)	34	4
14 _{1,13} → 13 _{1,12}	<i>ortho</i>	285475.477 ^F	101.8	2.63×10^{-4}	13.9	29	107(18)	10.5(0.2)	1.8(0.3)	54	4
15 _{1,15} → 14 _{1,14}	<i>ortho</i>	300197.596 ^F	114.3	3.07×10^{-4}	14.9	31	89(39)	10.7(0.4)	1.9(0.5)	44	2
15 _{3,13} → 14 _{3,12}	<i>ortho</i>	302991.695 ^F	219.7	3.04×10^{-4}	14.4	31	} 116(28)	11.0(0.3)	2.2(0.4)	49	2
15 _{3,12} → 14 _{3,11}	<i>ortho</i>	302993.234 ^F	219.7	3.04×10^{-4}	14.4	31					

Notes. Frequencies, E_u/k , A_{ul} , S_{ul} , and g_u from MADEX code, that fit to all rotational lines reported in the CDMS database.

S. Cuadrado et al.: Complex organic molecules in strongly UV-irradiated gas

Table B.8. Line parameters of HC₃N.

Transition	Frequency	E_u/k	A_{ul}	S_{ul}	g_u	$\int T_{MB} dv$	v_{LSR}	Δv	T_{MB}	S/N
$J_u \rightarrow J_l$	[MHz]	[K]	[s ⁻¹]			[mK km s ⁻¹]	[km s ⁻¹]	[km s ⁻¹]	[mK]	
9 \rightarrow 8	81881.462 ^F	19.6	4.22×10^{-5}	9.0	19	50(19)	10.8(0.2)	2.1(0.6)	23(s)	6
10 \rightarrow 9	90978.989 ^F	24.0	5.81×10^{-5}	10.0	21	86(11)	10.5(0.2)	2.9(0.4)	28	6
11 \rightarrow 10	100076.385 ^F	28.8	7.77×10^{-5}	11.0	23	80(14)	10.5(0.2)	1.8(0.3)	42	6
12 \rightarrow 11	109173.637 ^F	34.1	1.01×10^{-4}	12.0	25	76(8)	10.7(0.1)	2.0(0.2)	37	10
15 \rightarrow 14	136464.402 ^W	52.4	1.99×10^{-4}	15.0	31	164(59)	—	—	—	3
16 \rightarrow 15	145560.949 ^W	59.4	2.42×10^{-4}	16.0	33	95(59)	—	—	—	4
17 \rightarrow 16	154657.288 ^W	66.8	2.91×10^{-4}	17.0	35	162(36)	—	—	—	5
18 \rightarrow 17	163753.404 ^W	74.7	3.46×10^{-4}	18.0	37	162(20)	—	—	—	8
19 \rightarrow 18	172849.285 ^W	83.0	4.08×10^{-4}	19.0	39	169(17)	—	—	—	2
23 \rightarrow 22	209230.199 ^F	120.5	7.27×10^{-4}	23.0	47	54(16)	10.8(0.2)	1.7(0.6)	30	5
24 \rightarrow 23	218324.709 ^F	131.0	8.26×10^{-4}	24.0	49	16(4)	10.9(0.1)	0.6(0.2)	24	4

Notes. Frequencies, E_u/k , A_{ul} , S_{ul} , and g_u from MADEx code, that fit to all rotational lines reported by de Zafra (1971); Mbosei et al. (2000); Creswell et al. (1977); Chen et al. (1991); Yamada et al. (1995); Thorwirth et al. (2000).

Table B.9. Line parameters of CH₃CN.

Transition	Sym.*	Frequency	E_u/k	A_{ul}	S_{ul}	g_u	$\int T_{MB} dv$	v_{LSR}	Δv	T_{MB}	S/N
$(J_K)_u \rightarrow (J_K)_l$		[MHz]	[K]	[s ⁻¹]			[mK km s ⁻¹]	[km s ⁻¹]	[km s ⁻¹]	[mK]	
5 ₄ \rightarrow 4 ₄	E	91958.726 ^F	119.5	2.28×10^{-5}	1.8	11	26(13)	12.5(0.5)	2.0(1.0)	13	3
5 ₃ \rightarrow 4 ₃	A	91971.130 ^F	77.5	4.06×10^{-5}	6.4	22	103(9)	10.2(0.2)	4.0(0.4)	24	6
5 ₂ \rightarrow 4 ₂	E	91979.993 ^F	33.8	5.33×10^{-5}	4.2	11	84(16)	10.6(0.3)	3.0(0.7)	26	6
5 ₁ \rightarrow 4 ₁	E	91985.313 ^F	12.4	6.09×10^{-5}	4.8	11	114(12)	10.5(0.1)	2.6(0.4)	40	9
5 ₀ \rightarrow 4 ₀	A	91987.087 ^F	13.2	6.35×10^{-5}	5.0	11	138(13)	10.9(0.1)	2.8(0.4)	46	11
6 ₃ \rightarrow 5 ₃	A	110364.353 ^F	82.8	8.35×10^{-5}	9.0	26	151(11)	10.8(0.1)	2.7(0.2)	53	8
6 ₂ \rightarrow 5 ₂	E	110374.988 ^F	39.1	9.89×10^{-5}	5.3	13	87(10)	10.7(0.1)	2.0(0.3)	40	7
6 ₁ \rightarrow 5 ₁	E	110381.371 ^F	17.7	1.08×10^{-4}	5.8	13	144(10)	10.8(0.1)	2.1(0.2)	65	10
6 ₀ \rightarrow 5 ₀	A	110383.499 ^F	18.5	1.11×10^{-4}	6.0	13	137(10)	10.8(0.1)	2.1(0.2)	62	11
7 ₄ \rightarrow 6 ₄	E	128739.669 ^W	131.0	1.20×10^{-4}	4.7	15	75(49)	—	—	—	2
7 ₃ \rightarrow 6 ₃	A	128757.029 ^W	89.0	1.46×10^{-4}	11.4	30	181(59)	—	—	—	3
7 ₂ \rightarrow 6 ₂	E	128769.435 ^W	45.3	1.64×10^{-4}	6.4	15	112(62)	—	—	—	4
7 ₁ \rightarrow 6 ₁	E	128776.880 ^W	23.8	1.75×10^{-4}	6.8	15	425(59)	—	—	—	6
7 ₀ \rightarrow 6 ₀	A	128779.363 ^W	24.7	1.79×10^{-4}	7.0	15					
8 ₃ \rightarrow 7 ₃	A	147149.068 ^W	96.1	2.31×10^{-4}	13.8	34	149(31)	—	—	—	4
8 ₂ \rightarrow 7 ₂	E	147163.243 ^W	52.3	2.52×10^{-4}	7.5	17	98(33)	—	—	—	2
8 ₁ \rightarrow 7 ₁	E	147171.751 ^W	30.9	2.65×10^{-4}	7.9	17	385(41)	—	—	—	8
8 ₀ \rightarrow 7 ₀	A	147174.587 ^W	31.8	2.69×10^{-4}	8.0	17					
9 ₄ \rightarrow 8 ₄	E	165518.064 ^W	146.0	3.09×10^{-4}	7.2	19	85(23)	—	—	—	3
9 ₃ \rightarrow 8 ₃	A	165540.376 ^W	104.0	3.43×10^{-4}	16.0	38	177(20)	—	—	—	9

S. Cuadrado et al.: Complex organic molecules in strongly UV-irradiated gas

Table B.9. continued

Transition	Sym.*	Frequency	E_u/k	A_{ul}	S_{ul}	g_u	$\int T_{MB} dv$	v_{LSR}	Δv	T_{MB}	S/N
$(J_K)_u \rightarrow (J_K)_l$		[MHz]	[K]	[s ⁻¹]			[mK km s ⁻¹]	[km s ⁻¹]	[km s ⁻¹]	[mK]	
$9_2 \rightarrow 8_2$	E	165556.321 ^W	60.3	3.66×10^{-4}	8.6	19	108(19)	—	—	—	7
$9_1 \rightarrow 8_1$	E	165565.890 ^W	38.8	3.81×10^{-4}	8.9	19	} 419(24)	—	—	—	14
$9_0 \rightarrow 8_0$	A	165569.080 ^W	39.7	3.86×10^{-4}	9.0	19		—	—	—	
$11_3 \rightarrow 10_3$	A	202320.442 ^F	122.6	6.58×10^{-4}	20.3	46	140(11)	10.7(0.1)	2.0(0.2)	64	8
$11_2 \rightarrow 10_2$	E	202339.920 ^F	78.8	6.87×10^{-4}	10.6	23	78(9)	10.7(0.1)	1.5(0.2)	49	6
$11_1 \rightarrow 10_1$	E	202351.610 ^F	57.4	7.05×10^{-4}	10.9	23	103(13)	10.7(0.2)	2.9(0.4)	33	5
$11_0 \rightarrow 10_0$	A	202355.507 ^F	58.3	7.11×10^{-4}	11.0	23	135(11)	10.7(0.1)	2.3(0.2)	55	7
$12_4 \rightarrow 11_4$	E	220679.287 ^F	175.1	8.22×10^{-4}	10.7	25	44(12)	10.9(0.3)	1.8(0.5)	23	4
$12_3 \rightarrow 11_3$	A	220709.016 ^F	133.2	8.68×10^{-4}	22.5	50	100(15)	10.7(0.1)	1.8(0.4)	52	8
$12_2 \rightarrow 11_2$	E	220730.259 ^F	89.4	9.00×10^{-4}	11.7	25	61(15)	10.6(0.3)	1.7(0.0)	34	6
$12_1 \rightarrow 11_1$	E	220743.009 ^F	68.0	9.20×10^{-4}	11.9	25	122(15)	10.4(0.1)	1.7(0.2)	72	11
$12_0 \rightarrow 11_0$	A	220747.259 ^F	68.9	9.26×10^{-4}	12.0	25	69(15)	10.9(0.2)	1.7(0.3)	38	6
$13_3 \rightarrow 12_3$	A	239096.495 ^F	144.6	1.12×10^{-3}	24.6	54	94(16)	10.8(0.1)	1.9(0.5)	46	7
$13_2 \rightarrow 12_2$	E	239119.503 ^F	100.9	1.15×10^{-3}	12.7	27	20(11)	10.6(0.3)	1.0(0.8)	19	3
$13_0 \rightarrow 12_0$	A	239137.914 ^F	80.3	1.18×10^{-3}	13.0	27	52(9)	10.5(0.2)	1.3(0.4)	23	3
$14_4 \rightarrow 13_4$	E	257448.128 ^F	199.0	1.36×10^{-3}	12.9	29	29(10)	10.6(0.3)	1.5(0.6)	19	3
$14_3 \rightarrow 13_3$	A	257482.790 ^F	157.0	1.41×10^{-3}	26.7	58	57(17)	10.6(0.2)	1.5(0.3)	36	5
$14_2 \rightarrow 13_2$	E	257507.560 ^F	113.3	1.45×10^{-3}	13.7	29	55(10)	10.7(0.1)	1.3(0.3)	40	6
$14_1 \rightarrow 13_1$	E	257522.425 ^F	91.8	1.47×10^{-3}	13.9	29	53(11)	10.8(0.3)	2.0(0.5)	24	4
$14_0 \rightarrow 13_0$	A	257527.381 ^F	92.7	1.48×10^{-3}	14.0	29	42(8)	10.9(0.1)	1.0(0.2)	38	5
$15_3 \rightarrow 14_3$	A	275867.809 ^F	170.2	1.75×10^{-3}	28.8	62	61(14)	10.5(0.2)	1.5(0.4)	38	4
$15_2 \rightarrow 14_2$	E	275894.339 ^F	126.5	1.79×10^{-3}	14.7	31	31(9)	10.3(0.1)	0.7(0.3)	40	2
$15_1 \rightarrow 14_1$	E	275910.261 ^F	105.1	1.81×10^{-3}	14.9	31	30(12)	10.7(0.2)	0.7(0.2)	40	2
$16_3 \rightarrow 15_3$	A	294251.460 ^F	184.4	2.14×10^{-3}	30.9	66	55(13)	10.1(0.2)	1.2(0.2)	43	4
$16_2 \rightarrow 15_2$	E	294279.748 ^F	140.6	2.18×10^{-3}	15.7	33	33(15)	10.4(0.2)	0.9(0.3)	34	4
$16_1 \rightarrow 15_1$	E	294296.726 ^F	119.2	2.21×10^{-3}	15.9	33	34(9)	10.2(0.1)	1.0(0.2)	32	4
$16_0 \rightarrow 15_0$	A	294302.386 ^F	120.1	2.22×10^{-3}	16.0	33	27(9)	10.9(0.2)	0.8(0.2)	32	2

Notes. Frequencies, E_u/k , A_{ul} , S_{ul} , and g_u from MADEx code, that fit to all rotational lines reported by Kukolich et al. (1973); Boucher et al. (1977); Kukolich (1982); Pavone et al. (1990); Cazzoli & Puzzarini (2006); Šimečková et al. (2004); Müller et al. (2009).

S. Cuadrado et al.: Complex organic molecules in strongly UV-irradiated gas

Table B.10. Line parameters of CH₃OH.

Transition	Sym.*	Frequency	E_u/k	A_{ul}	S_{ul}	g_u	$\int T_{MB} dv$	v_{LSR}	Δv	T_{MB}	S/N
$(J_K)_u \rightarrow (J_K)_l$		[MHz]	[K]	[s ⁻¹]			[mK km s ⁻¹]	[km s ⁻¹]	[km s ⁻¹]	[mK]	
5 ₋₁ → 4 ₀	E	84521.172 ^F	32.5	1.97×10^{-6}	1.5	11	149(8)	10.6(0.1)	1.6(0.1)	86	18
8 ₀ → 7 ₁	A	95169.391 ^F	83.5	2.13×10^{-6}	1.8	17	59(6)	10.4(0.1)	1.5(0.1)	54	14
2 ₁ → 1 ₁	A	95914.310 ^F	21.4	2.49×10^{-6}	1.5	5	28(12)	10.8(0.3)	1.7(0.7)	15	2
2 ₋₁ → 1 ₋₁	E	96739.358 ^F	4.6	2.56×10^{-6}	1.5	5	107(9)	10.7(0.1)	1.5(0.1)	67	9
2 ₀ → 1 ₀	A	96741.371 ^F	7.0	3.41×10^{-6}	2.0	5	206(9)	10.8(0.1)	1.7(0.2)	114	16
2 ₀ → 1 ₀	E	96744.545 ^F	12.2	3.41×10^{-6}	2.0	5	95(12)	10.7(0.1)	1.9(0.3)	44	6
2 ₁ → 1 ₁	E	96755.501 ^F	20.1	2.62×10^{-6}	1.5	5	66(13)	10.8(0.2)	2.0(0.5)	27	4
2 ₋₁ → 1 ₋₁	A	97582.798 ^F	21.6	2.63×10^{-6}	1.5	5	32(12)	10.5(0.2)	1.7(0.6)	18	4
3 ₁ → 4 ₀	A	107013.831 ^F	28.3	3.07×10^{-6}	0.7	7	30(12)	9.7(0.4)	2.2(0.2)	13	3
0 ₀ → 1 ₋₁	E	108893.945 ^F	5.2	1.47×10^{-5}	0.5	1	45(6)	10.7(0.1)	1.6(0.2)	26	7
6 ₋₁ → 5 ₀	E	132890.759 ^W	46.4	7.75×10^{-6}	1.8	13	191(31)	—	—	—	5
3 ₁ → 2 ₁	A	143865.795 ^W	28.3	1.07×10^{-5}	2.7	7	74(28)	—	—	—	3
3 ₋₁ → 2 ₋₁	E	145097.435 ^W	11.6	1.10×10^{-5}	2.7	7	269(28)	—	—	—	10
3 ₀ → 2 ₀	A	145103.185 ^W	13.9	1.23×10^{-5}	3.0	7	384(83)	—	—	—	12
3 ₋₂ → 2 ₋₂	A	145124.332 ^W	51.6	6.89×10^{-6}	1.7	7					
3 ₂ → 2 ₂	E	145126.191 ^W	28.3	6.77×10^{-6}	1.7	7	103(23)	—	—	—	4
3 ₋₂ → 2 ₋₂	E	145126.386 ^W	31.9	6.86×10^{-6}	1.7	7		—	—	—	
3 ₁ → 2 ₁	E	145131.864 ^W	27.1	1.13×10^{-5}	2.8	7	139(24)	—	—	—	5
3 ₂ → 2 ₂	A	145133.415 ^W	51.6	6.89×10^{-6}	1.7	7		—	—	—	
3 ₋₁ → 2 ₋₁	A	146368.328 ^W	28.6	1.13×10^{-5}	2.7	7	74(41)	—	—	—	3
9 ₀ → 8 ₁	A	146618.697 ^W	104.4	8.04×10^{-6}	2.1	19	92(26)	—	—	—	3
6 ₂ → 7 ₁	A	156127.544 ^W	86.5	6.74×10^{-6}	1.0	13	82(30)	—	—	—	3
2 ₁ → 3 ₀	A	156602.395 ^W	21.4	8.93×10^{-6}	0.5	5	149(35)	—	—	—	4
7 ₀ → 7 ₋₁	E	156828.517 ^W	70.2	1.88×10^{-5}	3.1	15	61(17)	—	—	—	2
6 ₀ → 6 ₋₁	E	157048.617 ^W	54.0	1.96×10^{-5}	2.8	13	82(27)	—	—	—	3
1 ₀ → 1 ₋₁	E	157270.832 ^W	7.5	2.21×10^{-5}	0.7	3					
3 ₀ → 3 ₋₁	E	157272.338 ^W	19.2	2.15×10^{-5}	1.7	7	355(53)	—	—	—	8
2 ₀ → 2 ₋₁	E	157276.019 ^W	12.2	2.18×10^{-5}	1.2	5		—	—	—	
1 ₁ → 1 ₀	E	165050.175 ^W	15.5	2.35×10^{-5}	0.7	3	56(22)	—	—	—	2
2 ₁ → 2 ₀	E	165061.130 ^W	20.1	2.34×10^{-5}	1.1	5	232(38)	—	—	—	4
3 ₁ → 3 ₀	E	165099.240 ^W	27.1	2.33×10^{-5}	1.6	7	170(28)	—	—	—	6
4 ₁ → 4 ₀	E	165190.475 ^W	36.4	2.32×10^{-5}	2.0	9	178(70)	—	—	—	6
5 ₁ → 5 ₀	E	165369.341 ^W	48.0	2.31×10^{-5}	2.4	11	127(25)	—	—	—	4
6 ₁ → 6 ₀	E	165678.649 ^W	61.9	2.29×10^{-5}	2.8	13	312(31)	—	—	—	6
7 ₁ → 7 ₀	E	166169.098 ^W	78.2	2.28×10^{-5}	3.2	15	102(23)	—	—	—	4
3 ₂ → 2 ₁	E	170060.592 ^W	28.3	2.55×10^{-5}	1.6	7	275(53)	—	—	—	7
1 ₁ → 2 ₀	A	205791.270 ^F	16.8	6.28×10^{-5}	0.9	3	47(16)	10.3(0.4)	2.5(0.7)	18	2
4 ₂ → 3 ₁	E	218440.063 ^F	37.6	4.69×10^{-5}	1.7	9	180(10)	10.7(0.1)	1.5(0.1)	113	15
8 ₋₁ → 7 ₀	E	229758.756 ^F	81.2	4.19×10^{-5}	2.5	17	110(14)	10.7(0.1)	1.5(0.1)	69	5
5 ₁ → 4 ₁	A	239746.219 ^F	49.1	5.66×10^{-5}	4.8	11	74(14)	10.4(0.1)	1.4(0.1)	53	3
5 ₀ → 4 ₀	E	241700.159 ^F	40.0	6.04×10^{-5}	5.0	11	251(21)	10.8(0.1)	2.6(0.3)	90	7
5 ₋₁ → 4 ₋₁	E	241767.234 ^F	32.5	5.81×10^{-5}	4.8	11	357(33)	10.4(0.2)	1.9(0.1)	224	15

S. Cuadrado et al.: Complex organic molecules in strongly UV-irradiated gas

Table B.10. continued.

Transition	Sym.*	Frequency	E_u/k	A_{ul}	S_{ul}	g_u	$\int T_{MB} dv$	v_{LSR}	Δv	T_{MB}	S/N
$(J_K)_u \rightarrow (J_K)_l$		[MHz]	[K]	[s ⁻¹]			[mK km s ⁻¹]	[km s ⁻¹]	[km s ⁻¹]	[mK]	
$5_0 \rightarrow 4_0$	A	241791.352 ^F	34.8	6.05×10^{-5}	5.0	11	646(43)	10.5(0.2)	2.2(0.2)	273	27
$5_{-4} \rightarrow 4_{-4}$	E	241813.255 ^F	114.8	2.18×10^{-5}	1.8	11	38(13)	10.7(0.2)	1.2(0.6)	28	2
$5_1 \rightarrow 4_1$	E	241879.025 ^F	48.0	5.96×10^{-5}	5.0	11	205(25)	10.5(0.3)	3.3(0.6)	56	7
$5_{-2} \rightarrow 4_{-2}$	E	241904.147 ^F	52.8	5.09×10^{-5}	4.2	11	179(21)	10.5(0.1)	2.4(0.3)	67	7
$5_2 \rightarrow 4_2$	E	241904.643 ^F	49.2	5.03×10^{-5}	4.2	11					
$5_{-1} \rightarrow 4_{-1}$	A	243915.788 ^F	49.7	5.97×10^{-5}	4.8	11	72(13)	10.8(0.1)	0.7(0.2)	99	7
$2_1 \rightarrow 1_0$	E	261805.675 ^F	20.1	5.57×10^{-5}	0.7	5	143(10)	10.7(0.1)	1.5(0.1)	89	7
$5_2 \rightarrow 4_1$	E	266838.148 ^F	49.2	7.74×10^{-5}	1.9	11	225(12)	10.7(0.1)	1.7(0.1)	124	10
$9_{-1} \rightarrow 8_0$	E	278304.512 ^F	102.1	7.69×10^{-5}	2.9	19	96(9)	10.7(0.1)	0.9(0.2)	100	10
$6_1 \rightarrow 5_1$	A	287670.767 ^F	62.9	1.01×10^{-4}	5.9	13	80(9)	10.8(0.2)	1.8(0.1)	42	3
$6_{-1} \rightarrow 5_{-1}$	A	292672.889 ^F	63.7	1.06×10^{-4}	5.9	13	82(23)	10.8(0.1)	0.9(0.2)	90	10
$3_0 \rightarrow 2_{-1}$	E	302369.773 ^F	19.2	4.66×10^{-5}	0.5	7	34(14)	10.0(0.1)	0.4(0.2)	84	3
$1_{-1} \rightarrow 1_0$	A	303366.921 ^F	16.9	2.26×10^{-4}	1.0	3	171(14)	10.5(0.1)	1.8(0.1)	89	5
$2_{-1} \rightarrow 2_0$	A	304208.348 ^F	21.6	2.12×10^{-4}	1.6	5	228(14)	10.3(0.1)	1.6(0.1)	134	7
$7_0 \rightarrow 6_0$	E	338124.488 ^F	70.2	1.70×10^{-4}	7.0	15	174(53)	10.5(0.2)	1.6(0.6)	101	3
$7_{-1} \rightarrow 6_{-1}$	E	338344.588 ^F	62.7	1.67×10^{-4}	6.9	15	260(64)	10.7(0.1)	1.5(0.2)	235	11
$7_0 \rightarrow 6_0$	A	338408.698 ^F	65.0	1.70×10^{-4}	7.0	15	440(69)	10.7(0.1)	1.6(0.1)	259	12
$7_3 \rightarrow 6_3$	E	338583.216 ^F	104.8	1.39×10^{-4}	5.8	15	59(20)	11.0(0.1)	0.4(0.1)	133	3
$7_2 \rightarrow 6_2$	E	338721.693 ^F	79.4	1.55×10^{-4}	6.4	15	161(22)	10.5(0.1)	1.3(0.1)	117	3
$7_{-2} \rightarrow 6_{-2}$	E	338722.898 ^F	83.0	1.57×10^{-4}	6.5	15					

Notes. Frequencies, E_u/k , A_{ul} , S_{ul} , and g_u from JPL catalogue.**Table B.11.** Line parameters of CH₃CHO.

Transition	Sym.*	Frequency	E_u/k	A_{ul}	S_{ul}	g_u	$\int T_{MB} dv$	v_{LSR}	Δv	T_{MB}	S/N
$(J_{K_a,K_c})_u \rightarrow (J_{K_a,K_c})_l$		[MHz]	[K]	[s ⁻¹]			[mK km s ⁻¹]	[km s ⁻¹]	[km s ⁻¹]	[mK]	
$5_{1,5} \rightarrow 4_{1,4}$	A	93580.909 ^F	15.7	2.63×10^{-5}	5.2	11	60(6)	10.4(0.1)	2.7(0.3)	21	6
$5_{1,5} \rightarrow 4_{1,4}$	E	93595.235 ^F	15.7	2.63×10^{-5}	5.2	11	51(7)	10.8(0.2)	2.3(0.4)	21	6
$5_{0,5} \rightarrow 4_{0,4}$	E	95947.437 ^F	13.8	2.96×10^{-5}	5.4	11	29(6)	10.7(0.3)	2.0(0.4)	13	3
$5_{0,5} \rightarrow 4_{0,4}$	A	95963.459 ^F	13.8	2.95×10^{-5}	5.4	11	54(13)	10.7(0.2)	2.0(0.5)	25	3
$5_{1,4} \rightarrow 4_{1,3}$	E	98863.314 ^F	16.5	3.10×10^{-5}	5.2	11	79(6)	11.1(0.3)	2.9(0.5)	26	3
$5_{1,4} \rightarrow 4_{1,3}$	A	98900.944 ^F	16.5	3.11×10^{-5}	5.2	11	63(10)	11.1(0.1)	1.6(0.3)	38	7
$6_{1,6} \rightarrow 5_{1,5}$	A	112248.716 ^F	21.1	4.67×10^{-5}	6.3	13	57(10)	10.7(0.2)	2.0(0.3)	27	5
$6_{1,6} \rightarrow 5_{1,5}$	E	112254.508 ^F	21.1	4.67×10^{-5}	6.3	13	46(11)	11.2(0.2)	1.9(0.5)	23	4
$6_{0,6} \rightarrow 5_{0,5}$	E	114940.175 ^F	19.4	5.16×10^{-5}	6.5	13	95(18)	11.0(0.2)	2.2(0.5)	40	4
$6_{0,6} \rightarrow 5_{0,5}$	A	114959.902 ^F	19.4	5.15×10^{-5}	6.5	13	106(15)	10.6(0.1)	2.0(0.3)	49	5
$7_{1,7} \rightarrow 6_{1,6}$	A	130891.821 ^W	27.4	7.54×10^{-5}	7.4	15	135(44)	—	—	—	4
$7_{1,7} \rightarrow 6_{1,6}$	E	130892.749 ^W	27.4	7.55×10^{-5}	7.4	15					

S. Cuadrado et al.: Complex organic molecules in strongly UV-irradiated gas

Table B.11. continued.

Transition	Sym.*	Frequency	E_u/k	A_{ul}	S_{ul}	g_u	$\int T_{MB} dv$	v_{LSR}	Δv	T_{MB}	S/N
$(J_{K_a, K_c})_u \rightarrow (J_{K_a, K_c})_l$		[MHz]	[K]	[s ⁻¹]			[mK km s ⁻¹]	[km s ⁻¹]	[km s ⁻¹]	[mK]	
$7_{1,6} \rightarrow 6_{1,5}$	A	138319.628 ^W	28.8	8.90×10^{-5}	7.4	15	166(62)	—	—	—	3
$8_{1,8} \rightarrow 7_{1,7}$	E	149505.128 ^W	34.6	1.14×10^{-4}	8.5	17	} 193(96)	—	—	—	2
$8_{1,8} \rightarrow 7_{1,7}$	A	149507.462 ^W	34.6	1.14×10^{-4}	8.5	17		—	—	—	
$8_{0,8} \rightarrow 7_{0,7}$	E	152607.614 ^W	33.1	1.23×10^{-4}	8.6	17	184(74)	—	—	—	4
$8_{1,7} \rightarrow 7_{1,6}$	E	157937.697 ^W	36.4	1.34×10^{-4}	8.5	17	86(21)	—	—	—	4
$8_{1,7} \rightarrow 7_{1,6}$	A	157974.590 ^W	36.4	1.34×10^{-4}	8.5	17	105(24)	—	—	—	6
$9_{1,9} \rightarrow 8_{1,8}$	E	168088.618 ^W	42.6	1.64×10^{-4}	9.6	19	} 98(36)	—	—	—	3
$9_{1,9} \rightarrow 8_{1,8}$	A	168093.444 ^W	42.7	1.64×10^{-4}	9.6	19		—	—	—	
$9_{0,9} \rightarrow 8_{0,8}$	A	171296.985 ^W	41.3	1.75×10^{-4}	9.7	19	158(92)	—	—	—	2
$11_{1,11} \rightarrow 10_{1,10}$	E	205161.898 ^F	61.4	3.02×10^{-4}	11.7	23	74(10)	10.6(0.2)	2.4(0.3)	29	4
$11_{1,11} \rightarrow 10_{1,10}$	A	205170.686 ^{F,B}	61.5	3.01×10^{-4}	11.7	23	—	—	—	—	—
$11_{0,11} \rightarrow 10_{0,10}$	A	208267.045 ^F	60.4	3.17×10^{-4}	11.8	23	62(9)	10.6(0.1)	1.8(0.3)	33	5
$11_{1,10} \rightarrow 10_{1,9}$	E	216581.930 ^F	64.8	3.55×10^{-4}	11.7	23	47(10)	10.7(0.2)	1.4(0.5)	32	5
$11_{1,10} \rightarrow 10_{1,9}$	A	216630.234 ^F	64.8	3.55×10^{-4}	11.7	23	53(7)	10.7(0.1)	1.5(0.2)	33	5
$12_{1,12} \rightarrow 11_{1,11}$	E	223650.093 ^F	72.2	3.92×10^{-4}	12.8	25	68(9)	10.8(0.1)	1.9(0.3)	34	6
$12_{1,12} \rightarrow 11_{1,11}$	A	223660.603 ^F	72.2	3.92×10^{-4}	12.8	25	58(11)	10.7(0.2)	2.2(0.5)	24	4
$12_{0,12} \rightarrow 11_{0,11}$	E	226551.622 ^F	71.3	4.10×10^{-4}	12.9	25	114(6)	10.5(0.3)	2.5(0.5)	43	6
$12_{0,12} \rightarrow 11_{0,11}$	A	226592.725 ^F	71.3	4.10×10^{-4}	12.9	25	54(15)	11.4(0.1)	1.0(0.4)	50	4
$12_{1,11} \rightarrow 11_{1,10}$	E	235996.212 ^F	76.1	4.61×10^{-4}	12.8	25	77(23)	10.8(0.3)	2.0(0.8)	36	3
$12_{1,11} \rightarrow 11_{1,10}$	A	236049.131 ^F	76.1	4.61×10^{-4}	12.8	25	39(15)	10.8(0.2)	1.0(0.5)	38	3
$13_{1,13} \rightarrow 12_{1,12}$	A	242118.136 ^F	83.8	5.00×10^{-4}	13.9	27	43(17)	10.0(0.5)	2.5(1.3)	16	2
$13_{0,13} \rightarrow 12_{0,12}$	A	244832.176 ^F	83.1	5.18×10^{-4}	13.9	27	48(10)	11.5(0.1)	1.2(0.3)	39	3
$13_{1,12} \rightarrow 12_{1,11}$	E	255326.968 ^F	88.4	5.86×10^{-4}	13.9	27	65(13)	10.9(0.2)	2.0(0.5)	30	5
$13_{1,12} \rightarrow 12_{1,11}$	A	255384.754 ^F	88.4	5.86×10^{-4}	13.9	27	67(10)	10.6(0.1)	1.8(0.3)	34	6
$14_{0,14} \rightarrow 13_{0,13}$	E	262960.097 ^F	95.7	6.44×10^{-4}	15.0	29	32(7)	10.5(0.2)	1.3(0.3)	23	4
$14_{1,13} \rightarrow 13_{1,12}$	E	274563.412 ^F	101.5	7.31×10^{-4}	15.0	29	38(11)	10.9(0.2)	1.0(0.3)	35	2
$15_{1,15} \rightarrow 14_{1,14}$	A	278939.438 ^F	109.7	7.69×10^{-4}	16.1	31	22(7)	10.5(0.2)	1.0(0.4)	23	3
$15_{0,15} \rightarrow 14_{0,14}$	A	281126.944 ^F	109.2	7.88×10^{-4}	16.1	31	29(11)	10.7(0.3)	1.4(0.5)	19	2

Notes. ^B Blended with CF⁺ 2 → 1. Frequencies, E_u/k , A_{ul} , S_{ul} , and g_u from JPL catalogue.

Capítulo 9

Fotoisomerización del Ácido Fórmico

9.1. Ácido Fórmico

El ácido metanoico, más conocido con el nombre de ácido fórmico (del latín *formica*, hormiga; ver Apéndice C.4), es el ácido orgánico más simple, con solo un átomo de carbono. Su fórmula química es muy sencilla, ya que solo contiene un grupo funcional ácido unido a un hidrógeno, H-COOH. Dependiendo de la orientación del enlace de hidrógeno, se pueden encontrar dos variedades geométricas (conformeros) del ácido fórmico, denominadas cis y trans.

La isomería conformacional se refiere a isómeros (moléculas con la misma fórmula pero con estructura química diferente) que tienen los mismos enlaces químicos, pero diferentes orientaciones geométricas alrededor de un solo enlace. Estos isómeros se denominan conformeros. Para que un conformero se transforme en el otro generalmente hay que superar una barrera de energía, por ejemplo con luz (proceso conocido como fotoisomerización o fotoconmutación). La fotoisomerización se ha estudiado en experimentos de laboratorio en fase gas (e.g. Ryan & Levy 2001), en experimentos donde el hielo se irradia con radiación IR (e.g. Maçôas et al. 2004), en procesos biológicos y en moléculas poliatómicas grandes. Pero hasta ahora no se había observado en el espacio.

De los dos conformeros del ácido fórmico, el conformero trans es el más estable y fue el primer ácido detectado en el medio interestelar (Zuckerman et al. 1971). El trans-HCOOH en fase gas muestra abundancias moderadas

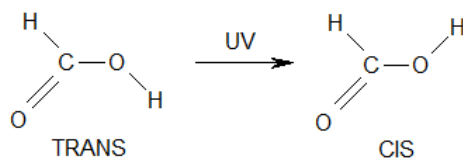
hacia *hot cores* (Liu et al. 2001) y *hot corinos* (Cazaux et al. 2003), en nubes frías y oscuras (Cernicharo et al. 2012) y en la coma de cometas como Hale-Bopp (Bockelée-Morvan et al. 2000). El HCOOH en fase sólida también está presente en los hielos interestelares (Keane et al. 2001) y en los meteoritos condriticos (Briscoe & Moore 1993).

El estado vibracional de la especie cis-HCOOH es $1365 \pm 30 \text{ cm}^{-1}$ mayor en energía que el conformero trans (Hocking 1976). La barrera de energía de la rotación interna (es decir, la conversión del conformero trans al cis) es de $\sim 4827 \text{ cm}^{-1}$ (Hocking 1976), aproximadamente 7000 K en unidades de temperatura. Esta temperatura es mucho más elevada que la energía térmica disponible en las nubes moleculares (que tienen temperaturas típicas entre $\sim 10 - 300 \text{ K}$). Generalizando este razonamiento, se podría esperar que en las nubes del medio interestelar solo existiese el conformero más estable de una especie dada. Sin embargo, la fotoisomerización puede ser un mecanismo viable para producir los conformeros menos estables en abundancias detectables: un conformero dado absorbe un fotón de alta energía que excita radiativamente a la molécula a estados electrónicos por encima de la barrera de energía de la interconversión. La posterior desexcitación radiativa al estado fundamental (fluorescencia) dejaría a la molécula en un conformero diferente.

En el ácido fórmico, la fluorescencia desde el estado electrónico excitado S1 al fundamental S0 se produce al

absorber fotones con $E \lesssim 5$ eV, entre $\lambda = 2300 - 2800$ Å (la absorción de fotones con $E \gtrsim 5$ eV produce la fotodisociación de la molécula). Este mecanismo de fluorescencia desde el estado excitado S1 es una posible ruta de fotoisomerización trans \rightarrow cis. Además, la barrera de energía de la isomerización desde el estado S1 (~ 1400 cm $^{-1}$) es mucho más baja que desde el nivel fundamental (~ 4827 cm $^{-1}$).

En este Capítulo se presenta primera detección del conformero cis-HCOOH en el espacio y se investiga si el mecanismo de la fotoisomerización se produce en el medio interestelar induciendo cambios estructurales en moléculas interestelares sometidas a radiación UV (Cuadrado et al. 2016). En el Apéndice C.4 se incluye el artículo de divulgación “Ácido fórmico entre las estrellas” basado en este trabajo (publicado en El Mundo).



9.2. Análisis y principales resultados

Para investigar si el mecanismo de fotoisomerización se produce en el medio interestelar, se han buscado líneas rotacionales de los conformeros trans y cis-HCOOH en la banda espectral de 3 mm. Se observaron tres fuentes interestelares conocidas por tener una química muy rica y una emisión molecular brillante: (i) la región de fotodisociación de la Barra de Orión: el borde de la nube de Orión irradiada por fotones FUV (frente de disociación), y dos posiciones interiores menos irradiadas; (ii) el *hot core* de Orión KL: gas caliente alrededor de protoestrellas masivas (e.g. Tercero et al. 2010); y (iii) Barnard 1–b (B1–b): una nube fría y oscura (e.g. Cernicharo et al. 2012). Las dos últimas fuentes están protegidas de la radiación UV estelar.

Se resumen a continuación los principales resultados extraídos del análisis de las observaciones:

- Las frecuencias de las líneas rotacionales de ambos conformeros se han calculado específicamente ajustando los datos de laboratorio disponibles (Winnewisser et al. 2002, Cazzoli et al. 2010) con el código MADEX.

- El conformero trans-HCOOH se ha detectado en todas las fuentes observadas, sin embargo, el conformero cis-HCOOH solo se ha detectado en el borde iluminado de la Barra de Orión, posición (+10'', -10''), lo cual representa la primera detección interestelar de dicho conformero. En esta posición se han identificado 12 líneas de rotación

del cis-HCOOH y 10 líneas del trans-HCOOH.

- Se han ajustado todas las líneas detectadas en el frente de disociación de la Barra de Orión con perfiles gaussianos usando el software CLASS obteniendo sus intensidades integradas de línea, velocidades LSR, anchuras y temperaturas de antena. Las líneas atribuidas a HCOOH muestran un perfil de línea gaussiano centrado a la velocidad sistémica de la Barra de Orión (10.4 ± 0.3 km s $^{-1}$). Las líneas son estrechas, con anchos de línea de 1.9 ± 0.3 km s $^{-1}$. El gran número de líneas detectadas y el hecho de que ninguna de las líneas coincide en frecuencia con transiciones de moléculas abundantes presentes en la Barra ni con ninguna otra línea en catálogos espectroscópicos (JPL, CDMS o MADEX), representa una detección robusta del conformero cis.

- Se ha realizado un análisis conocido como *line stacking* que consiste en sumar los espectros de las líneas del conformero cis que presenten energías rotacionales y coeficientes de Einstein similares en escala de velocidades (centrados en la v_{LSR} de la Barra). Con ello se pretende mejorar la relación S/N y comprobar que no existan líneas débiles entre el ruido en las posiciones donde no se detecta el conformero cis. Así se demuestra que el cis-HCOOH se detecta solamente cerca del borde iluminado por radiación FUV de la Barra, pero que la emisión desaparece hacia el interior de la nube que está más protegida de la radiación FUV. Tampoco se detecta el conformero cis en el *hot core* de Orión KL ni

en B1–b empleando el análisis de *line stacking*.

■ Dado el gran número de líneas de HCOOH detectadas en la Barra, se ha podido determinar la densidad de columna y la temperatura de rotación de ambos confórmeros con precisión. En particular, se ha estimado un cociente de abundancias trans/cis de 2.8 ± 1.0 . También se han calculado límites de abundancia del cociente trans/cis en el *hot core* de Orión KL y en B1-b (>100 y >60 , respectivamente), y son mucho mayores que el calculado en la Barra. Esto sugiere que la presencia de cis-HCOOH en el frente de disociación de la Barra de Orión está relacionada con el fuerte campo FUV que ilumina la región.

■ Como parte de la colaboración con un equipo de físico-químicos teóricos (IFF y UAM), el mecanismo de fotoisomerización se ha estudiado con cálculos cuánticos *ab initio* (para calcular las secciones eficaces de fluorescencia y las probabilidades de fotoisomerización hasta ahora desconocidas). También se ha empleado el código de PDR Meudon para calcular el flujo de fotones FUV que produce la fluorescencia del HCOOH en diferentes posiciones de la nube:

1. Se han calculado las superficies de energía potencial del HCOOH de los estados electrónicos S0 y S1 en función de los dos grados de libertad más relevantes, ϕ_1 , el ángulo de torsión del OH y ϕ_2 , el ángulo de torsión del CH. Después se ha procedido a calcular el rango de longitudes de onda en donde se produce la fluorescencia ($\lambda = 2300 - 2800 \text{ \AA}$), las secciones eficaces de fluorescencia y las probabilidades de la fotoisomerización trans \rightarrow cis y cis \rightarrow trans.
2. Se ha calculado el flujo de fotones FUV entre 911 \AA y 3000 \AA , $N_{\text{ph}}(\lambda)$, en unidades de fotón $\text{cm}^{-2} \text{ s}^{-1} \text{ \AA}^{-1}$ (el cual depende de la fuente de radiación FUV y de la extinción visual en la nube, A_V) en varias posiciones de la Barra de Orión con un modelo termoquímico y de transferencia radiativa (código de PDR Meudon). En general (para un campo de radiación FUV plano, independiente de la longitud de onda), la fotodisociación del HCOOH siempre va a dominar sobre la fluorescencia ya que las secciones eficaces de fotodisociación son mayores y los fotones disociantes pueden absorberse en un rango de energía más amplio ($E \gtrsim 5 \text{ eV}$). Sin embargo, la intensidad y la

forma del campo de radiación interestelar FUV dependen de A_V y de las propiedades de absorción del polvo y del gas. Por lo tanto, $N_{\text{ph}}(\lambda)$ cambia drásticamente desde el borde iluminado de la nube hasta el interior apantallado. En particular, el número de fotones FUV de baja energía (e.g. $\lesssim 5 \text{ eV}$) con respecto a los fotones de alta energía (e.g. aquellos por encima de 11 eV capaces de disociar moléculas como CO e ionizar átomos como el carbono) aumenta con A_V . De hecho, los PAHs y los pequeños granos de polvo reducen considerablemente la cantidad de fotones disociantes entre $\lambda = 1700 - 2500 \text{ \AA}$ (Cardelli et al. 1989, Joblin et al. 1992) en relación a los fotones que producen la fluorescencia del HCOOH (Fig. 9.1).

3. Con el flujo de fotones FUV en cada punto de la nube, las secciones eficaces de fluorescencia y las probabilidades de que se produzca la isomerización por medio de un proceso de fluorescencia, se puede calcular el número de fotoisomerizaciones trans \rightarrow cis y cis \rightarrow trans por segundo (ξ_{tc} y ξ_{ct} , respectivamente). En ausencia de cualquier otro mecanismo que destruya el HCOOH, el cociente $\xi_{\text{tc}}/\xi_{\text{ct}}$ proporciona la relación de abundancias trans/cis en el equilibrio. El tiempo necesario para alcanzar este equilibrio se calcula como $(\xi_{\text{tc}} + \xi_{\text{ct}})^{-1}$.

Se ha calculado que a una profundidad de $A_V \simeq 2 - 3 \text{ mag}$, y si el número de fotones disociantes es pequeño en comparación con el número de fotones que producen la fotoisomerización del HCOOH (es decir, la mayoría de los fotones con $E \gtrsim 5 \text{ eV}$ han sido absorbidos por los PAHs y los pequeños granos de polvo), el confórmero cis se detectaría con un cociente de abundancias trans/cis $\simeq 3.5 - 4.1$. Estos valores se aproximan al cociente de abundancias trans/cis calculado a partir de nuestras observaciones en el frente de disociación de la Barra de Orión. También se ha calculado que el tiempo necesario para lograr una baja relación de abundancias trans/cis y hacer que el cis-HCOOH sea detectable a $A_V \simeq 2 - 3 \text{ mag}$ es de $10^4 - 10^5$ años. Esto es razonablemente rápido y más breve que el tiempo de vida de la nube. Más cerca de la superficie irradiada ($A_V \simeq 0 - 2 \text{ mag}$), los fotones disociantes destruyen la molécula mucho más rápido que el tiempo necesario para que se produzca la isomerización trans \rightarrow cis.

Por otro lado, a altas profundidades dentro de la nube, el flujo de fotones capaces de producir fluorescencia disminuye hasta valores para los cuales alcanzar el equilibrio de isomerización tomaría una cantidad de tiempo poco realista ($>10^6$ años para $A_V = 5$ mag). Por lo tanto, la detección del conformero cis-HCOOH en las capas iluminadas de la Barra de Orión, donde la mayor parte del carbono forma parte del CO (señal de la disminución del flujo de fotones FUV de alta energía), concuerda con el mecanismo de fotoisomerización.

■ Se han estudiado cualitativamente otros dos posibles mecanismos para la isomerización trans \rightarrow cis en el medio interestelar: (i) La isomerización del HCOOH en los mantos de los granos de polvo después de haber sido irradiados con radiación IR y la posterior desorción a la fase gas;

(ii) La isomerización por colisiones del HCOOH con electrones energéticos (~ 0.5 eV). Se puede concluir que si estos fuesen los mecanismos dominantes de la isomerización trans \rightarrow cis, las líneas de emisión del cis-HCOOH se habrían detectado en otras fuentes interestelares.

Hasta ahora, la isomerización por absorción de fotones UV no se había considerado como un posible mecanismo para inducir cambios estructurales en las moléculas en el gas interestelar. La detección del cis-HCOOH en la Barra de Orión abre nuevas vías para detectar otros conformeros menos estables en el espacio. Esto podría tener numerosas implicaciones en astroquímica y astrobiología.

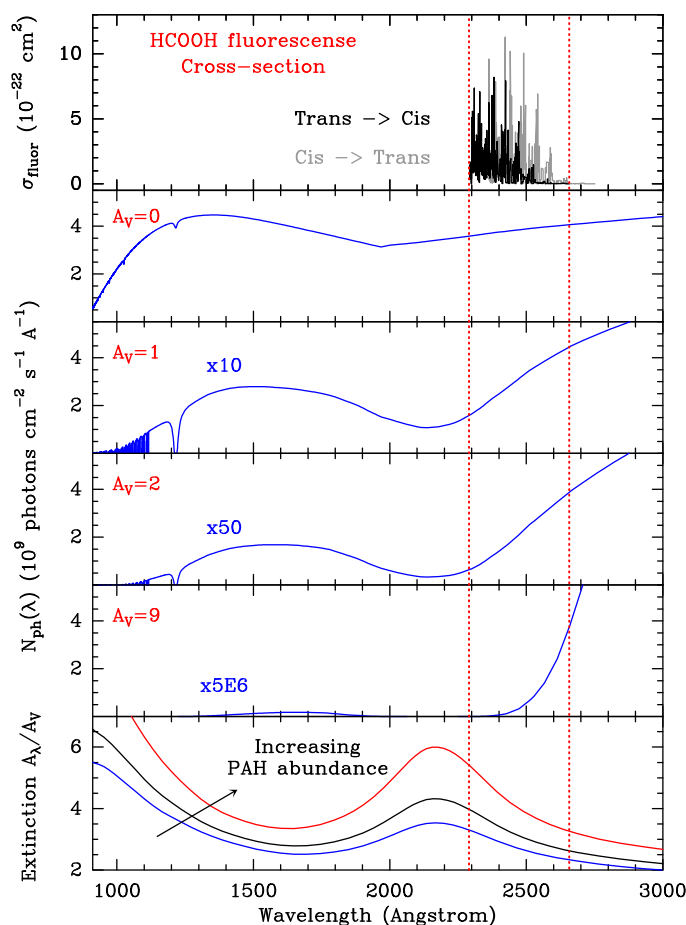


Figura 9.1: Panel Superior: Secciones eficaces de fluorescencia estimadas mediante cálculos cuánticos *ab initio*. Paneles Centrales: Variación del número de fotones FUV entre 911 Å y 3000 Å, en unidades de fotón $\text{cm}^{-2} \text{ s}^{-1} \text{ \AA}^{-1}$, en varias posiciones de la Barra de Orión con extinciones visuales crecientes. Panel Inferior: Curva de extinción del polvo en función de la longitud de onda. La extinción aumenta con el incremento de la abundancia de PAHs.

9.3. Cuadrado et al. 2016 (A&A)

A&A 596, L1 (2016)
DOI: [10.1051/0004-6361/201629913](https://doi.org/10.1051/0004-6361/201629913)
© ESO 2016

**Astronomy
&
Astrophysics**

LETTER TO THE EDITOR

***Trans-cis* molecular photoswitching in interstellar space[★]**

S. Cuadrado¹, J. R. Goicoechea¹, O. Roncero², A. Aguado³, B. Tercero¹, and J. Cernicharo¹

¹ Grupo de Astrofísica Molecular, Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid (ICMM-CSIC), Sor Juana Ines de la Cruz 3, 28049 Cantoblanco, Madrid, Spain

e-mail: [s.cuadrado;jr.goicoechea]@icmm.csic.es, jose.cernicharo@csic.es

² Instituto de Física Fundamental (IFF-CSIC), Calle Serrano 123, 28006 Madrid, Spain

³ Facultad de Ciencias, Unidad Asociada de Química-Física Aplicada CSIC-UAM, Universidad Autónoma de Madrid, 28049 Madrid, Spain

Received 17 October 2016 / Accepted 2 November 2016

ABSTRACT

As many organic molecules, formic acid (HCOOH) has two conformers (*trans* and *cis*). The energy barrier to internal conversion from *trans* to *cis* is much higher than the thermal energy available in molecular clouds. Thus, only the most stable conformer (*trans*) is expected to exist in detectable amounts. We report the first interstellar detection of *cis*-HCOOH. Its presence in ultraviolet (UV) irradiated gas exclusively (the Orion Bar photodissociation region), with a low *trans*-to-*cis* abundance ratio of 2.8 ± 1.0 , supports a photoswitching mechanism: a given conformer absorbs a stellar photon that radiatively excites the molecule to electronic states above the interconversion barrier. Subsequent fluorescent decay leaves the molecule in a different conformer form. This mechanism, which we specifically study with ab initio quantum calculations, was not considered in Space before but likely induces structural changes of a variety of interstellar molecules submitted to UV radiation.

Key words. astrochemistry – line: identification – ISM: clouds – ISM: molecules – photon-dominated region (PDR)

1. Introduction

Conformational isomerism refers to isomers (molecules with the same formula but different chemical structure) having the same chemical bonds but different geometrical orientations around a single bond. Such isomers are called conformers. An energy barrier often limits the isomerization. This barrier can be overcome by light. Photoisomerization (or photoswitching) has been studied in ice IR-irradiation experiments (e.g., [Maçôas et al. 2004](#)), in biological processes, and, for large polyatomic molecules, in gas-phase experiments ([Ryan & Levy 2001](#)). HCOOH is the simplest organic acid and has two conformers (*trans* and *cis*) depending on the orientation of the hydrogen single bond. The most stable *trans* conformer was the first acid detected in the interstellar medium (ISM; [Zuckerman et al. 1971](#)). Gas-phase *trans*-HCOOH shows moderate abundances towards hot cores ([Liu et al. 2001](#)) and hot corinos ([Cazaux et al. 2003](#)), in cold dark clouds ([Cernicharo et al. 2012](#)), and in cometary coma ([Bockelée-Morvan et al. 2000](#)). Solid HCOOH is present in interstellar ices ([Keane et al. 2001](#)) and in chondritic meteorites ([Briscoe & Moore 1993](#)).

The ground-vibrational state of *cis*-HCOOH is $1365 \pm 30 \text{ cm}^{-1}$ higher in energy than the *trans* conformer ([Hocking 1976](#)). The energy barrier to internal rotation (the conversion from *trans* to *cis*) is approximately 4827 cm^{-1} ([Hocking 1976](#)), approximately 7000 K in temperature units. This is much higher than the thermal energy available in molecular clouds (having typical temperatures from approximately 10 to 300 K). Generalizing this reasoning, only the most stable conformer of a given species would be expected in such clouds. Photoswitching,

however, may be a viable mechanism producing the less stable conformers in detectable amounts: a given conformer absorbs a high-energy photon that radiatively excites the molecule to electronic states above the interconversion energy barrier. Subsequent radiative decay to the ground-state would leave the molecule in a different conformer.

In this work we searched for pure rotational lines of the *trans*- and *cis*-HCOOH conformers in the 3 millimetre spectral band. We observed three prototypical interstellar sources known to display a very rich chemistry and bright molecular line emission: (i) the Orion Bar photodissociation region (PDR); the edge of the Orion cloud irradiated by ultraviolet (UV) photons from nearby massive stars (e.g., [Goicoechea et al. 2016](#)); (ii) the Orion hot core: warm gas around massive protostars (e.g., [Tercero et al. 2010](#)); and (iii) Barnard 1-b (B1-b): a cold dark cloud (e.g., [Cernicharo et al. 2012](#)). The two latter sources are shielded from strong UV radiation fields. We only detect *cis*-HCOOH towards the Orion Bar. This represents the first interstellar detection of the conformer.

2. Source selection and observations

Because of its nearly edge-on orientation, the Orion Bar PDR is a template source to study the molecular content as the far-UV radiation field (FUV; stellar photons with energies below 13.6 eV, or wavelengths (λ) longer than 911 Å, the hydrogen atom ionisation threshold) is attenuated from the cloud edge to the interior ([Hollenbach & Tielens 1999](#)). The impinging FUV radiation field at the edge of the Bar is approximately 4×10^4 times the mean interstellar radiation field (e.g., [Goicoechea et al. 2016](#), and references therein). We observed three positions of the Bar characterized by a decreasing FUV photon flux.

We have used the IRAM-30 m telescope (Pico Veleta, Spain) and the 90 GHz EMIR receiver. We employed the Fast Fourier

[★] This paper makes use of observations obtained with the IRAM-30 m telescope. IRAM is supported by INSU/CNRS (France), MPG (Germany), and IGN (Spain).

A&A 596, L1 (2016)

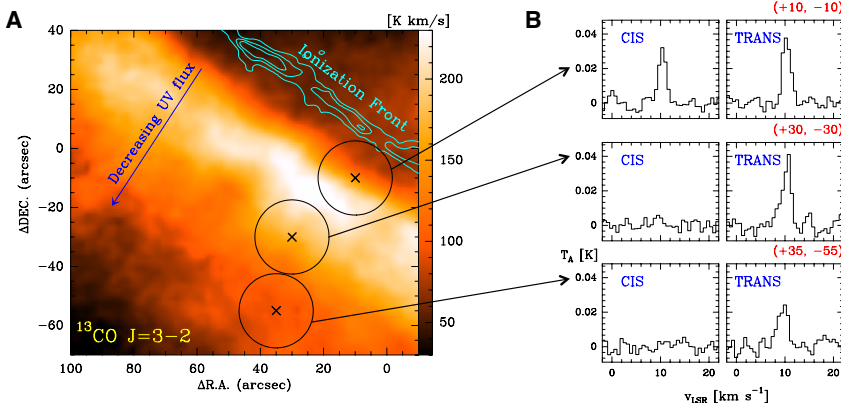


Fig. 1. Detection of *cis*-HCOOH towards the FUV-illuminated edge of the Orion Bar. *Left:* $^{13}\text{CO } J=3 \rightarrow 2$ integrated emission image with a HPBW of $8''$ obtained with the IRAM-30 m telescope (Cuadrado et al., in prep.). The cyan contour marks the position of neutral cloud boundary traced by the O I $1.317 \mu\text{m}$ fluorescent line emission (in contours from 3 to $7 \text{ by } 2 \times 10^{-4} \text{ erg s}^{-1} \text{ cm}^{-2} \text{ sr}^{-1}$; Walmsley et al. 2000). *Right:* *Cis*- and *trans*-HCOOH stacked spectra towards the observed positions.

Transform Spectrometer (FFTS) backend at 200 kHz spectral resolution (0.7 km s^{-1} at 90 GHz). Observations towards the Orion Bar are part of a complete millimetre (mm) line survey ($80\text{--}360 \text{ GHz}$, Cuadrado et al. 2015). They include specific deep searches for HCOOH lines in the 3 mm band towards three different positions located at a distance of $14''$, $40''$, and $65''$ from the ionisation front (Fig. 1A). Their offset coordinates with respect to the $\alpha_{2000} = 05^{\text{h}}35^{\text{m}}20.1^{\text{s}}$, $\delta_{2000} = -05^{\circ}25'07.0''$ position at the ionisation front are $(+10'', -10'')$, $(+30'', -30'')$, and $(+35'', -55'')$. The observing procedure was position switching with a reference position at $(-600'', 0'')$ to avoid the extended emission from the Orion molecular cloud. The half power beam width (HPBW) at 3 mm ranges from $\sim 30.8''$ to $21.0''$. We reduced and analyzed the data using the GILDAS software as described in Cuadrado et al. (2015). The antenna temperature, T_A^* , was converted to the main beam temperature, T_{MB} , using $T_{\text{MB}} = T_A^* / \eta_{\text{MB}}$, where η_{MB} is the antenna efficiency ($\eta_{\text{MB}} = 0.87\text{--}0.82$ at 3 mm). The rms noise obtained after 5 h integration is $\sim 1\text{--}5 \text{ mK}$ per resolution channel.

We also searched for HCOOH in regions shielded from strong FUV radiation fields (see Appendix E). We selected two chemically rich sources for which we have also carried out deep mm-line surveys with the IRAM-30 m telescope: towards the hot core in Orion BN/KL (Tercero et al. 2010) and towards the quiescent dark cloud Barnard 1-b (B1-b; Cernicharo et al. 2012).

3. Results

3.1. Line identification

We specifically computed the *cis*-HCOOH rotational line frequencies by fitting the available laboratory data (Winnewisser et al. 2002) with our own spectroscopic code, MADEX (Cernicharo 2012). The standard deviation of the fit is 60 kHz . For the *trans* conformer, higher-frequency laboratory data (Cazzoli et al. 2010) were also used in a separate fit. The standard deviation of the fit for *trans*-HCOOH is 42 kHz . These deviations are smaller than the frequency resolution of the spectrometer we used to carry out the astronomical observations. Formic acid is a near prolate symmetric molecule with rotational levels distributed in different K_a rotational ladders ($K_a = 0, 1, 2, \dots$). Both *a*- and *b*-components of its electric dipole moment μ exist (Winnewisser et al. 2002). The dipole moments of the *cis* conformer ($\mu_a = 2.650 \text{ D}$ and $\mu_b = 2.710 \text{ D}$, Hocking 1976) are stronger than those of the *trans* conformer ($\mu_a = 1.421 \text{ D}$ and $\mu_b = 0.210 \text{ D}$, Kuze et al. 1982).

In total, we identify 12 rotational lines of *cis*-HCOOH and 10 of *trans*-HCOOH above 3σ towards the FUV-illuminated edge of the Orion Bar, $(+10'', -10'')$ position. The detected

lines from the *cis*- and *trans*-HCOOH are shown in Figs. 2 and D.1, respectively. Lines attributed to HCOOH show a Gaussian line profile centred at the systemic velocity of the Orion Bar ($10.4 \pm 0.3 \text{ km s}^{-1}$). Lines are narrow, with line widths of $1.9 \pm 0.3 \text{ km s}^{-1}$. The large number of detected lines, and the fact that none of the lines correspond to transitions of abundant molecules known to be present in the Bar or in spectroscopic line catalogues, represents a robust detection of the *cis* conformer. The observational parameters and Gaussian fit results are tabulated in Tables F.1 and F.2 for the *cis* and *trans* conformer, respectively.

3.2. Line stacking analysis

Complex organic molecules have relatively low abundances in FUV-irradiated interstellar gas (Guzmán et al. 2014). Indeed, detected *trans*-HCOOH lines are faint. To improve the statistical significance of our search towards the positions inside the Bar, we performed a line stacking analysis. For each observed position, we added spectra at the expected frequency of several HCOOH lines that could be present within the noise level (sharing similar rotational level energies and Einstein coefficients). The spectra in frequency scale were first converted to local standard of rest (LSR) velocity scale and resampled to the same velocity channel resolution before stacking. We repeated this procedure for *trans*-HCOOH lines. This method allows us to search for any weak line signal from the two conformers that could not be detected individually.

Figure 1B shows a comparison of the stacking results for *cis* and *trans*-HCOOH lines towards the three target positions in the Bar. Although we detect *trans*-HCOOH in all positions, emission from the *cis* conformer is only detected towards the position located closer to the cloud edge, $(+10'', -10'')$. They demonstrate that *cis*-HCOOH is detected close to the FUV-illuminated edge of the Bar, but that the emission disappears towards the more shielded cloud interior.

A similar stacking analysis was carried out for the Orion hot core and B1-b spectra. Although we detect several *trans*-HCOOH lines, the *cis* conformer was not detected towards the hot core and the cold dark cloud (see Appendix E).

3.3. Trans-to-cis abundance ratios

Given the number of HCOOH lines detected towards the Bar, we can determine the column density and rotational temperatures of both conformers accurately (see Appendix D). In particular, we infer a low *trans*-to-*cis* abundance ratio of 2.8 ± 1.0 . The non-detection of *cis*-HCOOH towards the Orion hot core and B1-b (see Appendix E) provides much higher *trans*-to-*cis* limits (>100 and >60 , respectively). This suggests that the presence

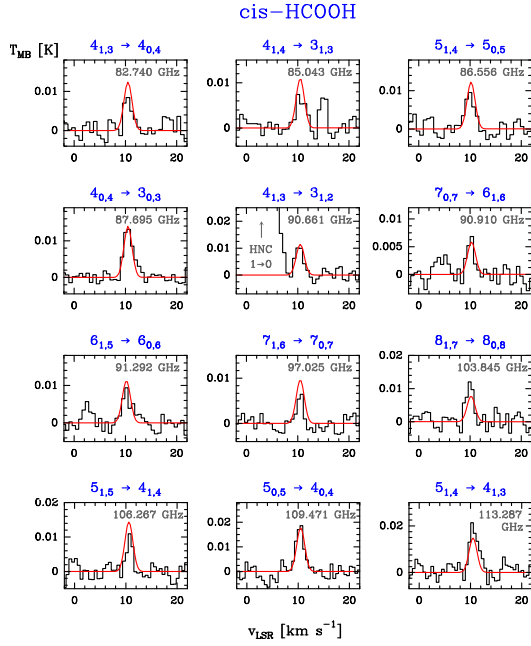
S. Cuadrado et al.: *Trans-cis* molecular photoswitching in interstellar space

Fig. 2. Detected *cis*-HCOOH rotational lines towards the Orion Bar, (+10'', -10'') position. The ordinate refers to the intensity scale in main beam temperature units, and the abscissa to the LSR velocity. Line frequencies (in GHz) are indicated at the top-right of each panel together with the rotational quantum numbers (in blue). The red curve shows an excitation model that reproduces the observations.

of *cis*-HCOOH in the Orion Bar PDR is related to the strong FUV field permeating the region.

4. Photoisomerization rates and discussion

Photolysis of HCOOH has been widely studied both experimentally (Sugarman 1943; Ioannoni et al. 1990; Brouard & Wang 1992; Su et al. 2000) and theoretically (Beatty-Travis et al. 2002; He & Fang 2003; Maeda et al. 2015). Dissociation of HCOOH takes place after absorption of FUV photons with energies greater than ~ 5 eV ($\lambda < 2500$ Å). Recently, Maeda et al. (2015) determined that this dissociation threshold coincides with the crossing of the S_0 and T_1 electronic states of the molecule. The specific products of the photofragmentation process (of the different photodissociation channels) depend on the specific energy of the FUV photons and on the initial HCOOH conformer. Interestingly, absorption of lower energy photons does not dissociate the molecule but induces fluorescent emission. In particular, HCOOH fluorescence from the S_1 excited electronic state has been observed in laser-induced experiments performed in the $\lambda = 2500$ – 2700 Å range (Ioannoni et al. 1990; Brouard & Wang 1992). These studies indicate that the geometrical configuration of the two hydrogen atoms is different in the S_0 and S_1 states. The fluorescence mechanism from the S_1 state is a likely route for the *trans* \rightarrow *cis* isomerization. In addition, the isomerization barrier from the S_1 state (~ 1400 cm $^{-1}$) is much lower than from the ground.

In order to quantify the role of the photoswitching mechanism, we carried out ab initio quantum calculations and determined the HCOOH potential energy surfaces of the S_0 and S_1 electronic states as a function of the two most relevant degrees of freedom, ϕ_1 the torsional angle of OH and ϕ_2 , the torsional angle of CH (see Appendix A and Fig. A.1). With this calculation we can compute the position of the photon absorptions leading

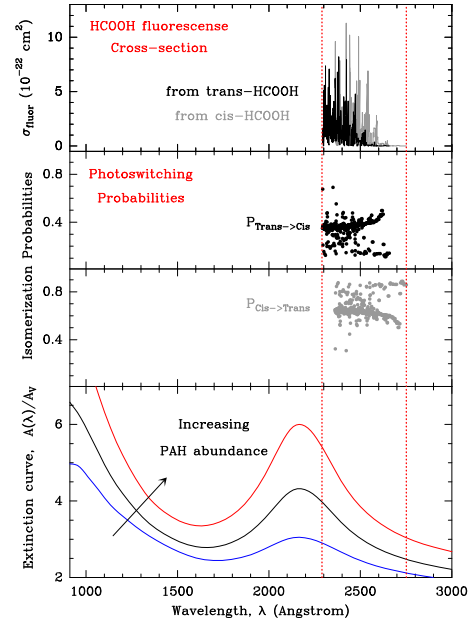


Fig. 3. Ab initio absorption cross-sections and photoisomerization probabilities computed in this work. *Top panel:* *trans*- and *cis*-HCOOH absorption cross-sections for photons with $E < 5$ eV (those leading to fluorescence). *Middle panels:* normalized probabilities of bound-bound decays producing isomerization (*trans* \rightarrow *cis* and *cis* \rightarrow *trans*). *Bottom panel:* standard interstellar dust extinction curve (blue). Black and red curves show the effect of an increased PAH abundance.

to fluorescence (those in the approximate $\lambda = 2300$ – 2800 Å range), and the probabilities to fluoresce from one conformer to the other (the *trans*-to-*cis* and *cis*-to-*trans* photoswitching cross-sections and probabilities, see Fig. 3).

With knowledge of $N_{\text{ph}}(\lambda)$, the FUV photon flux in units of photon cm $^{-2}$ s $^{-1}$ Å $^{-1}$, we can calculate the number of *trans*-to-*cis* and *cis*-to-*trans* photoisomerizations per second (ξ_{ic} and ξ_{ct} , respectively, see Appendix B). In the absence of any other mechanism destroying HCOOH, the $\xi_{\text{ct}}/\xi_{\text{ic}}$ ratio provides the *trans*-to-*cis* abundance ratio in equilibrium. The time needed to reach the equilibrium ratio is then $(\xi_{\text{ic}} + \xi_{\text{ct}})^{-1}$. $N_{\text{ph}}(\lambda)$, and thus ξ_{ic} and ξ_{ct} , depend on the FUV radiation sources (type of star) and on the cloud position. Describing the cloud depth position in terms of the visual extinction into the cloud (A_V), one magnitude of extinction is equivalent to a column density of approximately 10^{21} H $_2$ molecules per cm $^{-2}$ in the line-of-sight.

In general (for a flat, wavelength-independent FUV radiation field), HCOOH photodissociation will always dominate over fluorescence (photodissociation cross-sections are larger and the relevant photons can be absorbed over a broader energy range, $E > 5$ eV). The strength and shape of the interstellar FUV radiation field, however, are a strong function of A_V and are very sensitive to the dust and gas absorption properties. Because of the wavelength-dependence of the FUV-absorption process, $N_{\text{ph}}(\lambda)$ drastically changes as one moves from the cloud edge to the shielded interior. In particular, the number of low-energy FUV photons (e.g., below 5 eV) relative to the high-energy photons (e.g., those above 11 eV dissociating molecules such as CO and ionising atoms such as carbon) increases with A_V . In this work we used a FUV radiative transfer and thermochemical model (Le Petit et al. 2006; Goicoechea & Le Boulart 2007) to estimate $N_{\text{ph}}(\lambda)$ at different positions of the Orion Bar. The well-known “2175 Å bump” of the dust extinction curve

A&A 596, L1 (2016)

(absorption of $\lambda = 1700\text{--}2500\text{ \AA}$ photons by PAHs and small carbonaceous grains, Cardelli et al. 1989; Joblin et al. 1992) greatly reduces the number of HCOOH dissociating photons relative to those producing HCOOH fluorescence (Fig. 3, bottom panel). The resulting FUV radiation spectrum, $N_{\text{ph}}(\lambda)$, at different A_V is used to calculate ξ_{ic} and ξ_{ct} (Table B.1). We determine that at a cloud depth of approximately $A_V = 2\text{--}3$ mag, and if the number of HCOOH dissociating photons is small compared to the number of photons producing photoisomerization (i.e., most photons with $E > 5\text{ eV}$ have been absorbed), the *cis* conformer should be detectable with a *trans*-to-*cis* abundance ratio of approximately 3.5–4.1. These values are remarkably close to the *trans*-to-*cis* ratio inferred from our observations of the Bar.

Closer to the irradiated cloud edge ($A_V = 0\text{--}2$ mag), photodissociation destroys the molecule much faster than the time needed for the *trans*-to-*cis* isomerization. On the other hand, too deep inside the cloud, the flux of $E > 5\text{ eV}$ photons decreases to values for which the isomerization equilibrium would take an unrealistic amount of time ($>10^6$ yr for $A_V = 5$ mag). Therefore, our detection of *cis*-HCOOH in irradiated cloud layers where CO becomes the dominant carbon carrier (a signature of decreasing flux of high-energy FUV photons) agrees with the photoswitching scenario.

For standard grain properties and neglecting HCOOH photodissociation, we calculate that the time needed to achieve a low *trans*-to-*cis* abundance ratio and make *cis*-HCOOH detectable at $A_V = 2\text{--}3$ mag is $10^4\text{--}10^5$ yr (see Table B.1). This is reasonably fast, and shorter than the cloud lifetime. In practice, it is not straightforward to quantify the exact contribution of HCOOH photodissociation and photoisomerization at different cloud positions. The above time-scales require that the flux of $E > 5\text{ eV}$ dissociating photons is small compared to those producing fluorescence. This depends on the specific dust absorption properties, that sharply change with A_V as dust populations evolve (Draine 2003), on the strength and width of the 2175 \AA extinction bump, and on the role of molecular electronic transitions blanketing the FUV spectrum. The similar *trans*-HCOOH line intensities observed towards the three positions of the Bar (Fig. 1) suggest that even if the HCOOH photodestruction rate increases at the irradiated cloud edge, the HCOOH formation rate (from gas-phase reactions or desorbing directly from grain surfaces, Garrod et al. 2008) must increase as well. The inferred HCOOH abundances are not particularly high, $(0.6\text{--}3.0) \times 10^{-10}$ with respect to H. Hence, modest HCOOH photodestruction and formation rates are compatible with the photoswitching mechanism occurring in realistic times.

Although the observed abundances of *trans*- and *cis*-HCOOH in the Orion Bar are compatible with gas-phase photoisomerization, we note that photoswitching may also occur on the surface of grains covered by HCOOH ices. In a similar way, solid HCOOH (mostly *trans*) can absorb FUV photons that switch the molecule to the *cis* form before being desorbed. Once in the gas, both conformers will continue their photoisomerization following absorption of $\lambda \gtrsim 2500\text{ \AA}$ photons. Laboratory experiments are needed to quantify the mechanisms leading to HCOOH ice photoswitching by FUV photon absorption.

Searching for further support to the FUV photoswitching scenario, we qualitatively explored two other possibilities for the *trans*-to-*cis* conversion. First, the isomerization of solid HCOOH after IR irradiation of icy grain surfaces (as observed in the laboratory, Maçôas et al. 2004; Olbert-Majkut et al. 2008) and subsequent desorption to the gas-phase. Second, the gas-phase isomerization by collisions of HCOOH with energetic electrons

($\sim 0.5\text{ eV}$). We concluded that if these were the dominant isomerization mechanisms, emission lines from *cis*-HCOOH would have been detected in other interstellar sources (see Appendix C).

Isomerization by absorption of UV photons was not considered as a possible mechanism to induce structural changes of molecules in interstellar gas. The detection of *cis*-HCOOH towards the Orion Bar opens new avenues to detect a variety of less stable conformers in Space. This could have broad implications in astrochemistry and astrobiology.

Acknowledgements. We thank N. Marcelino for helping with the observations of B1-b. We thank the ERC for support under grant ERC-2013-Syg-610256-NANOCOSMOS. We also thank Spanish MINECO for funding support under grants AYA2012-32032 and FIS2014-52172-C2, and from the CONSOLIDER-Ingenio program “ASTROMOL” CSD 2009-00038. IRAM is supported by INSU/CNRS (France), MPG (Germany), and IGN (Spain).

References

- Beatty-Travis, L. M., Moule, D. C., Lim, E. C., & Judge, R. H. 2002, *J. Chem. Phys.*, **117**, 4831
- Blake, G. A., Sutton, E. C., Masson, C. R., & Phillips, T. G. 1987, *ApJ*, **315**, 621
- Bockelée-Morvan, D., Lis, D. C., Wink, J. E., et al. 2000, *A&A*, **353**, 1101
- Briscoe, J. F., & Moore, C. B. 1993, *Meteoritics*, **28**, 330
- Brouard, M., & Wang, J.-X. 1992, *J. Chem. Soc. Faraday Trans.*, **88**, 3511
- Cardelli, J. A., Clayton, G. C., & Mathis, J. S. 1989, *ApJ*, **345**, 245
- Cazaux, S., Tielens, A. G. G. M., Ceccarelli, C., et al. 2003, *ApJ*, **593**, L51
- Cazzoli, G., Pizzarini, C., Stopkiewicz, S., & Gauss, J. 2010, *A&A*, **520**, A64
- Cernicharo, J. 2012, in *EAS Pub. Ser.*, **58**, 251
- Cernicharo, J., Marcelino, N., Roueff, E., et al. 2012, *ApJ*, **759**, L43
- Cernicharo, J., Kisiel, Z., Tercero, B., et al. 2016, *A&A*, **587**, L4
- Cuadrado, S., Goicoechea, J. R., Pilleri, P., et al. 2015, *A&A*, **575**, A82
- Draine, B. T. 1978, *ApJS*, **36**, 595
- Draine, B. T. 2003, *ARA&A*, **41**, 241
- Garrod, R. T., Widicus Weaver, S. L., & Herbst, E. 2008, *ApJ*, **682**, 283
- Gerin, M., Pety, J., Fuente, A., et al. 2015, *A&A*, **577**, L2
- Goicoechea, J. R., & Le Bourlot, J. 2007, *A&A*, **467**, 1
- Goicoechea, J. R., Pety, J., Cuadrado, S., et al. 2016, *Nature*, **537**, 207
- Goldsmith, P. F., & Langer, W. D. 1999, *ApJ*, **517**, 209
- Guzmán, V. V., Pety, J., Gratier, P., et al. 2014, *Faraday Discussions*, **168**, 103
- He, H.-Y., & Fang, W.-H. 2003, *J. Am. Chem. Soc.*, **125**, 16139
- Hocking, W. H. 1976, *Zeitschrift Naturforschung Teil A*, **31**, 1113
- Hollenbach, D. J., & Tielens, A. G. G. M. 1999, *Rev. Mod. Phys.*, **71**, 173
- Ioannoni, F., Moule, D. C., & Clouthier, D. J. 1990, *J. Phys. Chem.*, **94**, 2290
- Joblin, C., Leger, A., & Martin, P. 1992, *ApJ*, **393**, L79
- Jørgensen, J. K., Harvey, P. M., Evans, II, N. J., et al. 2006, *ApJ*, **645**, 1246
- Keane, J. V., Tielens, A. G. G. M., Boogert, A. C. A., Schutte, W. A., & Whittet, D. C. B. 2001, *A&A*, **376**, 254
- Kuze, H., Kuga, T., & Shimizu, T. 1982, *J. Mol. Spectrosc.*, **93**, 248
- Le Petit, F., Nehmé, C., Le Bourlot, J., & Roueff, E. 2006, *ApJS*, **164**, 506
- Li, A., & Draine, B. T. 2001, *ApJ*, **554**, 778
- Liu, S.-Y., Mehringer, D. M., & Snyder, L. E. 2001, *ApJ*, **552**, 654
- Maçôas, E. M. S., Khriachtchev, L., Pettersson, M., Fausto, R., & Räsänen, M. 2004, *J. Chem. Phys.*, **121**, 1331
- Maeda, S., Taketsugu, T., & Morokuma, K. 2012, *J. Phys. Chem. Lett.*, **3**, 1900
- Maeda, S., Taketsugu, T., Ohno, K., & Morokuma, K. 2015, *J. Am. Chem. Soc.*, **137**, 3433
- Marcelino, N. 2007, Ph.D. Thesis, Universidad de Granada, Spain
- Öberg, K. I., Bottinelli, S., Jørgensen, J. K., & van Dishoeck, E. F. 2010, *ApJ*, **716**, 825
- Olbert-Majkut, A., Ahokas, J., Lundell, J., & Pettersson, M. 2008, *J. Chem. Phys.*, **129**, 041101
- Ryan, W. L., & Levy, D. H. 2001, *J. Am. Chem. Soc.*, **123**, 961
- Su, H., He, Y., Kong, F., Fang, W., & Liu, R. 2000, *J. Chem. Phys.*, **113**, 1891
- Sugarman, B. 1943, *Proc. Phys. Soc.*, **55**, 429
- Tercero, B., Cernicharo, J., Pardo, J. R., & Goicoechea, J. R. 2010, *A&A*, **517**, A96
- van Dishoeck, E. F., & Black, J. H. 1982, *ApJ*, **258**, 533
- Walmsley, C. M., Natta, A., Oliva, E., & Testi, L. 2000, *A&A*, **364**, 301
- Werner, H.-J., Knowles, P. J., Knizia, G., Manby, F. R., & Schütz, M. 2012, *Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science*, **2**, 242
- Winnewisser, M., Winnewisser, B. P., Stein, M., et al. 2002, *J. Mol. Spectrosc.*, **216**, 259
- Zuckerman, B., Ball, J. A., & Gottlieb, C. A. 1971, *ApJ*, **163**, L41

Appendix A: Ab initio estimation of fluorescence cross-sections and photoisomerization probabilities

In this appendix we demonstrate that the detected *cis*-HCOOH towards the Orion Bar can be produced by a gas-phase photo-switching mechanism. To estimate the FUV photon absorption cross-sections and probabilities of the *trans-cis* photoisomerization process, we start calculating the potential energy surfaces of the HCOOH S_0 and S_1 electronic states as a function of the two most relevant degrees of freedom, the torsional angle of OH (ϕ_1), and the torsional angle of CH (ϕ_2) (see Fig. A.1).

We performed ic-MRCI-F12 ab initio calculations using the MOLPRO suite of programs¹ with the VDZ-F12 basis set. The obtained results agree with the stationary points previously reported by Maeda et al. (2012, 2015). The molecular orbitals and reference configurations were determined with a CASSCF calculation using 16 active orbitals. The optimized equilibrium geometries in the S_0 and S_1 electronic states are in agreement with previous results, corresponding to planar and bent *trans*-HCOOH conformers, respectively. They are listed in Table A.1. For *trans*-HCOOH, the normal modes in the S_0 state have the following frequencies: 628.59, 662.86, 1040.64, 1117.90, 1316.0, 1416.22, 1792.32, 3083.01, and 3749.88 cm⁻¹. The two lowest frequencies correspond to the torsional angles of the OH and CH bonds, respectively.

For the two lower singlet states, S_0 and S_1 , we calculate a two-dimensional (2D) grid composed of 37 equally spaced points for ϕ_1 and ϕ_2 , fixing the remaining coordinates to the corresponding values listed in Table A.1. These points are interpolated using a two-dimension splines method to get the potential energy surfaces, S_0 and S_1 , at any desired geometry, including the two conformers.

The potential energy surface of the S_0 electronic state presents two minima for $\phi_2 = 0^\circ$, one at $\phi_1 = 0^\circ$ or 360° (*trans*), and a second at $\phi_1 = 180^\circ$ (*cis*). As illustrated in Fig. A.1, both minima correspond to a planar geometry. The potential for the S_1 excited state presents two equivalent wells for the *trans*-conformer ($\phi_1 = 300^\circ$, $\phi_2 = 120^\circ$ or $\phi_1 = 60^\circ$, $\phi_2 = 240^\circ$). Therefore, the minimum geometrical configuration in the S_1 excited state is no longer planar. The *cis* conformer minimum transforms into a shoulder of the potential. This is shown in the one-dimensional (1D) cut shown in Fig. A.1 for the case of $\phi_2 = 120^\circ$. In this case, the potential energy surface as a function of ϕ_1 is relatively flat, while it shows a double-well structure as a function of ϕ_2 , corresponding to geometries above and below the molecular plane.

We solved the two-dimension Shrödinger equation for ϕ_1 and ϕ_2 and obtained the vibrational eigenfunctions. The first six vibrational levels of the S_0 electronic state correspond to the *trans* conformer, the seventh energy level corresponds to the ground-vibrational state of *cis*-HCOOH. In the S_1 excited electronic state, the presence of a double well as a function of ϕ_2 implies that two degenerate vibrational states appear. The two well depths are different in geom- S_0 and geom- S_1 which means that their nodal structure changes significantly.

In a second step, we calculate the transition dipole moments for the 2D grids of geom- S_0 and geom- S_1 , and determine the transitions between the S_0 state and the S_1 state. We derive

¹ MOLPRO (Werner et al. 2012), version 2012, is a package of ab initio programs for advanced molecular electronic structure calculations, designed and maintained by H.-J. Werner and P. J. Knowles, and with contributions from many other authors (see <http://www.molpro.net>).

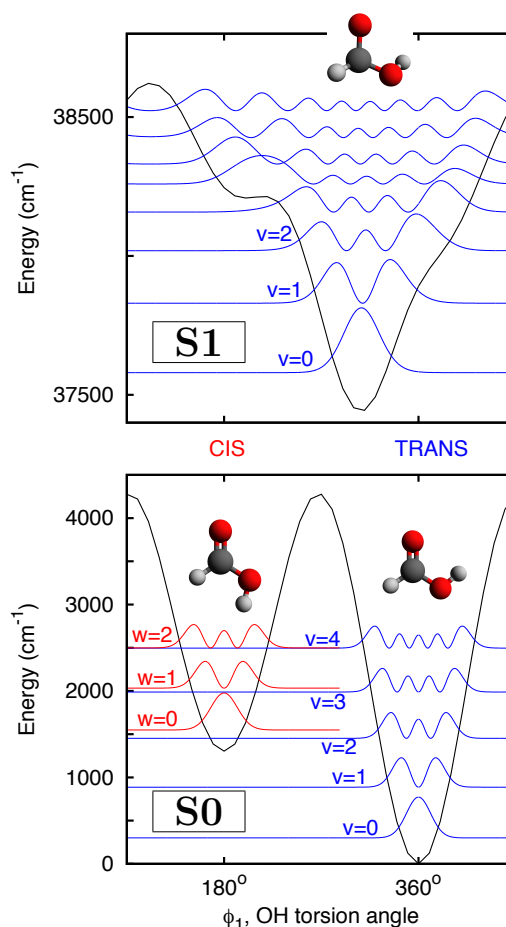


Fig. A.1. 1D potential energy surfaces of HCOOH as function of the OH torsional angle ϕ_1 . *Bottom panel:* ground S_0 electronic state. *Top panel:* excited S_1 state. 1D cuts were obtained from the 2D grid (see text) by setting $\phi_2 = 180^\circ$ and $\phi_2 = 300^\circ$ for S_0 and S_1 , respectively. We also show the vibrational-wave functions obtained from a 1D model. The different geometrical structures of the HCOOH molecule in each energy minimum are shown.

the absorption spectra starting from both *trans*-HCOOH ($v = 0$) and *cis*-HCOOH ($v = 7$) in the S_0 electronic ground-state, to the first 200 vibrational levels of the S_1 excited-state. The use of different geometries in the two electronic states allows us to approximately reproduce the experimental frequencies (Beatty-Travis et al. 2002). The absorption spectrum is obtained using the transition dipole moments obtained for geom- S_0 .

The calculated radiative lifetimes of the different vibrational levels of the S_1 electronic excited-state vary from 75×10^{-6} s to 375×10^{-6} s, but each level has a different probability to decay towards the *trans* or *cis* well of the S_0 ground electronic state. We explicitly determine the probability to fluoresce into each conformer by calculating:

$$P_{cis}(v) = \sum_{v', cis} \left| \langle S_0^{v'} | d | f_v^{S_1} \rangle \right|^2 \quad (\text{A.1})$$

and

$$P_{trans}(v) = \sum_{v', trans} \left| \langle S_0^{v'} | d | f_v^{S_1} \rangle \right|^2 \quad (\text{A.2})$$

A&A 596, L1 (2016)

Table A.1. Optimized geometries for *trans*-HCOOH in the ground (S_0) and excited electronic state (S_1).

Geometry of <i>trans</i> -HCOOH	S_0 ground-state (geom- S_0)	S_1 excited-state (geom- S_1)
$R(\text{CO}_1)$	1.1987	1.3683
$R(\text{CO}_2)$	1.3600	1.3840
$\theta(\text{O}_1\text{CO}_2)$	122.38	111.17
$R(\text{CH}_1)$	1.1008	1.0751
$\theta(\text{O}_1\text{CH}_1)$	124.01	113.06
$R(\text{OH}_1)$	0.9663	0.9661
$\theta(\text{CO}_2\text{H}_2)$	108.72	107.51
$\phi_1(\text{H}_2\text{O}_2\text{CO}_1)$	0.00	55.32
$\phi_2(\text{H}_1\text{CO}_1\text{O}_2)$	180.00	232.28

Notes. Distances are in Angstrom and angles in degree units.

where we separate the contributions of the ν' levels corresponding to the *trans* or *cis* conformers and normalize the sum to 1. We then normalize the above values and compute $P_{cis}(\nu)/(P_{cis}(\nu)+P_{trans}(\nu))$ and $P_{trans}(\nu)/(P_{cis}(\nu)+P_{trans}(\nu))$ for ν levels corresponding to absorption energies below approximately $40\,000\text{ cm}^{-1}$ ($E < 5\text{ eV}$), approximately the energy for which the dominant photodissociation channel opens and fluorescence starts to become negligible.

In summary, with these ab initio calculations we estimate the *cis*- and *trans*-HCOOH cross-sections σ_{λ_i} for absorption of photons with energies lower than approximately $40\,000\text{ cm}^{-1}$ (those producing fluorescence). These absorptions radiatively excite the molecule to the S_1 electronic excited-state. We explicitly compute the σ_{λ_i} values for each photon energy as well as the probabilities to fluoresce back to a specific *cis* or *trans* state (i.e., we determine the normalized probabilities of the different *trans* \rightarrow *cis*, *trans* \rightarrow *trans*, *cis* \rightarrow *cis*, *cis* \rightarrow *trans* bound-bound transitions). The $\sigma_{\lambda_i}(\text{trans})$ and $\sigma_{\lambda_i}(\text{cis})$ cross-sections and the $P_{trans \rightarrow cis}$ and $P_{cis \rightarrow trans}$ probabilities are plotted in Fig. 3.

Appendix B: Estimation of the photoisomerization rate in the Orion Bar

The number of photoisomerizations per second depends on the flux of FUV photons with energies below 5 eV. The *trans*-to-*cis* and *cis*-to-*trans* photoisomerization rates (ξ_{ic} and ξ_{ct}) are derived from the discrete sums:

$$\xi_{ic} = \sum_{\lambda_i} N_{ph, \lambda_i} \cdot \sigma_{\lambda_i}(\text{trans}) \cdot P_{t \rightarrow c} \quad (\text{B.1})$$

and

$$\xi_{ct} = \sum_{\lambda_i} N_{ph, \lambda_i} \cdot \sigma_{\lambda_i}(\text{cis}) \cdot P_{c \rightarrow t} \quad (\text{B.2})$$

where σ_{λ_i} is the absorption cross-section from a given conformer (in $\text{cm}^2\text{ photon}^{-1}$) and P is the probability to fluoresce from one isomer to the other. Both quantities are determined from our ab initio calculations (previous section). N_{ph, λ_i} ($\text{photon cm}^{-2}\text{ s}^{-1}$) is the flux of photons at each wavelength producing absorption.

In order to estimate the most realistic ξ_{ic} and ξ_{ct} rates for the FUV-irradiation conditions in the Orion Bar, we used the Meudon PDR code (Le Petit et al. 2006) and calculate $N_{ph}(\lambda)$ at

different cloud depth A_V values. Following our previous studies of the Bar (Cuadrado et al. 2015; Goicoechea et al. 2016) we run a model of an isobaric PDR ($P_{th}/k = 10^8\text{ K cm}^{-3}$) illuminated by $\chi = 4 \times 10^4$ times the mean interstellar radiation field (Draine 1978). For photons in the $\lambda = 2000\text{--}3000\text{ \AA}$ range, we adopt $N_{ph}(\lambda) = 4 \times 10^4 \times 732 \times \lambda^{0.7}\text{ photon cm}^{-2}\text{ s}^{-1}\text{ \AA}^{-1}$ at the PDR edge ($A_V = 0$) (van Dishoeck & Black 1982). We use a constant dust composition and size distribution that reproduces a standard interstellar extinction curve (Cardelli et al. 1989).

Table B.1 shows the resulting photoisomerization rates at different cloud depths, the expected *trans*-to-*cis* HCOOH abundance ratio at equilibrium, and the time needed to reach the equilibrium ratios (neglecting photodissociation).

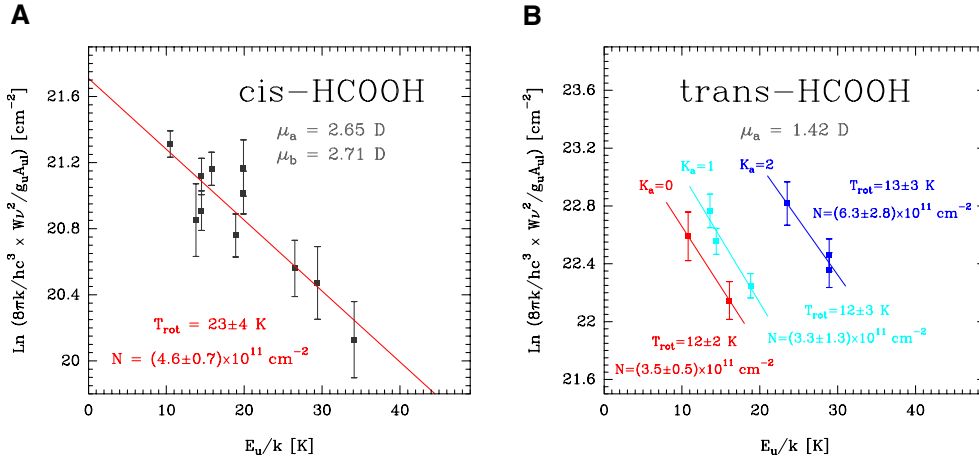
The use of constant dust grain properties through the PDR is likely the most important simplification for the calculation of the photoisomerization rates ξ_{ic} and ξ_{ct} . Grain populations are known to evolve in molecular clouds, especially in PDRs where the sharp attenuation of a strong FUV field results in a stratification of the dust and PAH properties with A_V (Draine 2003). Therefore, although the varying optical properties of grains are difficult to quantify and include in PDR models, they likely play a role on how FUV photons of different energies are differentially absorbed as a function of A_V (Goicoechea & Le Boulrot 2007). For the particular case of HCOOH, the strength and width of the 2175 \AA extinction bump (Cardelli et al. 1989) naturally divides the range of photons producing HCOOH photodissociation (those with $E > 5\text{ eV}$) from those producing fluorescence ($E < 5\text{ eV}$). The extinction bump has been related with the absorption of FUV photons by PAH mixtures and small carbonaceous grains (Joblin et al. 1992; Draine 2003). Although it is not known how the bump evolves with A_V , it clearly determines how the lower-energy FUV photons are absorbed. In Fig. 3 (bottom panel) we show different extinction curves for different PAH abundances (Goicoechea & Le Boulrot 2007). Optical properties are taken from Li & Draine (2001) and references therein. In addition, and as in most PDR models, our predicted FUV spectrum does not include the absorption produced by hundreds of molecular electronic transitions blanketing the FUV spectrum (other than H_2 and CO lines). Altogether, our assumption that the detected *cis*-HCOOH arises from PDR layers in which the flux of photons with $\lambda > 2500\text{ \AA}$ dominates over the higher-energy photodissociating photons is very plausible.

Appendix C: Alternative mechanisms for *trans*-to-*cis* isomerization in the ISM

Searching for further support to the photoswitching scenario, we qualitatively explored other possibilities that may apply in interstellar conditions. In the laboratory, *trans*-to-*cis* isomerization has been observed in molecular ices irradiated by near-IR photons (Maçôas et al. 2004; Olbert-Majkut et al. 2008). Hence, isomerization of solid HCOOH and subsequent desorption to the gas-phase might also be responsible of the *cis*-HCOOH enhancement. However, owing to the short lifetime of the *cis* conformer observed in ices (a few minutes if the irradiation is stopped, Maçôas et al. 2004), a very strong flux of IR photons would be needed to maintain significant abundances of solid *cis*-HCOOH. In addition, near-IR photons penetrate molecular clouds much deeper than FUV photons, and one would have expected to detect *cis*-HCOOH in all positions of the Bar, and towards the Orion hot core, a region irradiated by intense IR fields. Alternatively, the *trans*-to-*cis* isomerization might be triggered by collisions with electrons. Electrons are relatively abundant in

S. Cuadrado et al.: *Trans-cis* molecular photoswitching in interstellar space**Table B.1.** Photoisomerization rates for the irradiation conditions in the Orion Bar.

Cloud depth A_V [mag]	N_{ph} (2300–2800 Å) [photons cm ⁻² s ⁻¹]	ξ_{ic} [s ⁻¹]	ξ_{ct} [s ⁻¹]	<i>trans/cis</i> -HCOOH ratio at equilibrium	Time [yr]
0	1.96×10^{12}	5.45×10^{-11}	1.27×10^{-10}	2.3	1.7×10^2
1	1.80×10^{11}	3.41×10^{-12}	9.89×10^{-12}	2.9	2.4×10^3
2	2.84×10^{10}	3.79×10^{-13}	1.31×10^{-12}	3.5	1.9×10^4
3	4.93×10^9	4.62×10^{-14}	1.87×10^{-13}	4.1	1.3×10^5
5	1.69×10^8	7.83×10^{-16}	4.29×10^{-15}	5.5	6.2×10^6

**Fig. C.1.** Rotational population diagrams from the observed HCOOH lines towards the Orion Bar, (+10'', -10'') position. *Left:* diagram for the *cis* conformer (measurements lie along a single component). *Right:* diagram for the *trans* conformer showing how different K_a rotational ladders split in different components. Fitted values of the rotational temperature, T_{rot} , and column density, N , are indicated in each panel (see also Table C.1).

FUV-irradiated environments (with ionisation fractions up to approximately $n_e/n_H \approx 10^{-4}$) compared to shielded cloud interiors ($n_e/n_H \approx 10^{-9}$). Simple calculations show that electrons with energies of approximately 0.5 eV would be needed to overcome the energy barrier to HCOOH isomerization, and to produce a *trans*-to-*cis* abundance ratio of approximately 3. Such suprathermal electrons could be provided by the photoionisation of low ionisation potential atoms (C, S, Si...), but their abundance sharply decreases with A_V (Hollenbach & Tielens 1999). We estimate that at a cloud depth of $A_V = 2$ mag, HCOOH collisional isomerization, if effective, could compete with photo-switching only if the elastic collisional rate coefficients were very high; of the order of $>10^{-6}$ cm³ s⁻¹ for a typical electron density of $n_e < 1$ cm⁻³ in PDRs. However, the detection of *trans*-HCOOH, but not *cis*-HCOOH, towards other PDRs such as the Horsehead (Guzmán et al. 2014), with similar electron densities but much lower FUV photon flux (>100 times less than the Bar), supports a photoswitching mechanism in the Orion Bar (i.e., high ξ_{ic} and ξ_{ct} rates), but makes it too slow for the Horsehead and other low FUV-flux sources. Either way, we encourage laboratory and theoretical studies of the possible role of electron collisions, as well as more detailed investigation of the photo-switching mechanism of HCOOH and other species.

Appendix D: Rotational diagrams and column density calculation

Owing to the large number of detected HCOOH lines, we calculated rotational temperatures (T_{rot}) and column densities (N)

from rotational population diagrams. The standard relation for the rotational diagram (Goldsmith & Langer 1999) is:

$$\ln \frac{N_u}{g_u} = \ln N - \ln Q_{\text{rot}} - \frac{E_u}{kT_{\text{rot}}}, \quad (\text{D.1})$$

with N_u/g_u given by

$$\frac{N_u}{g_u} = \frac{8\pi k}{h c^3} \cdot \frac{\nu_{ul}^2}{A_{ul} g_u} \cdot \eta_{\text{bf}}^{-1} \cdot \int T_{\text{MB}} dv \quad [\text{cm}^{-2}]. \quad (\text{D.2})$$

In the above relation, N_u is the column density of the upper level in the optically thin limit [cm⁻²], N is the total column density [cm⁻²], g_u is the statistical weight of the upper state of each level, Q_{rot} is the rotational partition function evaluated at a rotational temperature T_{rot} , A_{ul} is the Einstein coefficient [s⁻¹], E_u/k is the energy of the upper level of the transition [K], ν_{ul} is the frequency of the $u \rightarrow l$ transition [s⁻¹], $\int T_{\text{MB}} dv$ is the velocity-integrated line intensity corrected from beam efficiency [K km s⁻¹], and η_{bf} is the beam filling factor. Assuming that the emission source has a 2D Gaussian shape, η_{bf} is equal to $\eta_{\text{bf}} = \theta_S^2 / (\theta_S^2 + \theta_B^2)$, with θ_B the HPBW of the telescope [arcsec] and θ_S the diameter of the Gaussian source [arcsec]. The values for ν_{ul} , E_u/k , g_u , and A_{ul} are taken from the MADEX spectral catalogue.

Rotational diagrams were built considering two limiting cases: (i) that the detected HCOOH emission is extended, with $\eta_{\text{bf}} = 1$; and (ii) that the emission is semi-extended, with $\theta_S = 9''$ (Cuadrado et al. 2015). In a plot of $\ln(N_u/g_u)$ versus the energy of the upper level of each rotational transition, E_u/k , the population

A&A 596, L1 (2016)

Table C.1. Rotational temperatures (T_{rot}), column densities (N), and abundances towards the Orion Bar PDR, (+10'', -10'') position.

	Extended source		Semi-extended source		Abundance*	Notes
	T_{rot} [K]	$N(\text{X})$ [cm^{-2}]	T_{rot} [K]	$N(\text{X})$ [cm^{-2}]		
<i>cis</i> -HCOOH	23 (4)	$4.6 (0.7) \times 10^{11}$	21 (4)	$4.2 (0.6) \times 10^{12}$		a
<i>trans</i> -HCOOH $K_a = 0$	12 (2)	$3.5 (0.5) \times 10^{11}$	6 (1)	$4.1 (0.6) \times 10^{12}$		a, b
<i>trans</i> -HCOOH $K_a = 1$	12 (3)	$3.3 (1.3) \times 10^{11}$	6 (1)	$3.6 (2.1) \times 10^{12}$		a
<i>trans</i> -HCOOH $K_a = 2$	13 (3)	$6.3 (2.8) \times 10^{11}$	7 (1)	$5.0 (2.4) \times 10^{12}$		a
[(<i>cis</i> + <i>trans</i>)-HCOOH]	—	$1.8 (0.3) \times 10^{12}$	—	$1.7 (0.3) \times 10^{13}$	$(0.3-2.7) \times 10^{-10}$	c

Notes. (a) The abundance of each species with respect to H nuclei is given by $\frac{N(\text{X})}{N_{\text{H}}} = \frac{N(\text{X})}{N(\text{H})+2N(\text{H}_2)}$, with $N(\text{H}_2) \approx 3 \times 10^{22} \text{ cm}^{-2}$ and $N(\text{H}) \approx 3 \times 10^{21} \text{ cm}^{-2}$ (Cuadrado et al. 2015, and references therein). (a) Rotational temperatures and column densities from rotational diagram analysis. (b) ΔN calculated assuming an error of 15%. (c) Total column densities calculated as the sum of the *cis* and *trans* species.

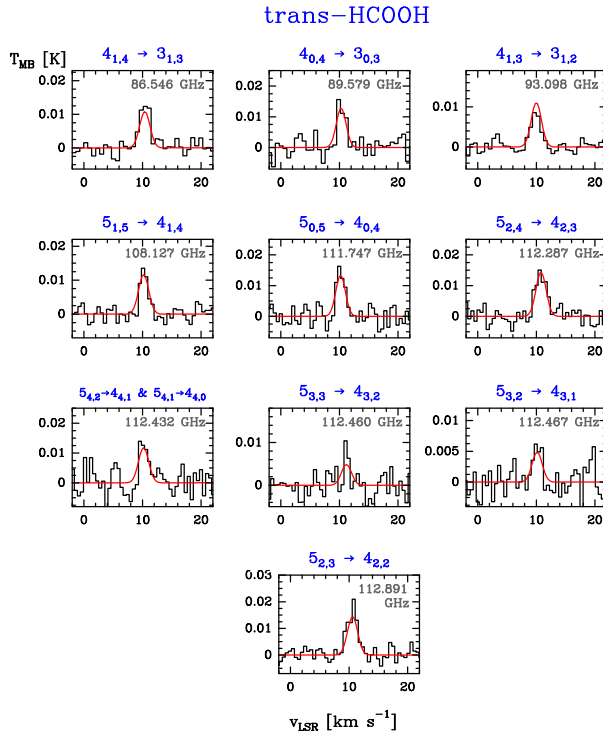


Fig. D.1. Detected *trans*-HCOOH rotational lines towards the edge of the Bar, (+10'', -10'') position. The ordinate refers to the intensity scale in main beam temperature units, and the abscissa to the LSR velocity. Line frequencies (in GHz) are indicated at the top-right of each panel together with the rotational quantum numbers (in blue). The red curve shows an excitation model that reproduces the observations. *Cis*-HCOOH lines are shown in Fig. 2.

distribution approximately follows a straight line with a slope $-1/T_{\text{rot}}$. The total column density of the molecule, N , is obtained from the y -intercept and the partition function. Figure C.1 shows the resulting rotational diagrams assuming extended emission. Table C.1 lists the T_{rot} and N obtained by linear least squares fits. The uncertainties shown in Table C.1 indicate the uncertainty obtained in the fit. The uncertainties obtained in the determination of the fit line parameters with CLASS are included in the error bars at each point of the rotational diagram.

To crosscheck that the relative intensities of the detected *cis*- and *trans*-HCOOH rotational lines are those expected according to their inferred rotational temperatures (i.e., that the assigned lines are not blended with lines from other molecules), we carried out a simple excitation and radiative transfer calculation using MADEX. We assumed that the *cis*- and *trans*-HCOOH rotational levels are populated following a Boltzmann distribution at a single rotational temperature (obtained from the rotational diagrams). For a given column density N , the model computes each line opacity (optically thin for the observed HCOOH lines) assuming a Gaussian line profile (for a linewidth of 2 km s^{-1}) and simulates the output mm spectrum at a given spectral resolution. Figures 2 and D.1 show the observed spectra (black histograms) and the modeled lines (red curves) for the T_{rot} and N values obtained assuming extended emission. The good agreement of the fits, and lack of any other candidate line from a different molecule in our catalogue, confirms that all detected lines belong to *cis*- and *trans*-HCOOH.

Appendix E: Non-detection of *cis*-HCOOH towards the Orion BN/KL hot core and Barnard-B1

We searched for *cis*-HCOOH in regions shielded from strong FUV radiation fields. We selected chemically rich sources for which we have also carried out deep mm-line surveys with the IRAM-30 m telescope. In particular, we searched for HCOOH towards the hot core in Orion BN/KL (Tercero et al. 2010) and towards the quiescent dark cloud Barnard 1-b (B1-b; Cernicharo et al. 2012). Although we clearly detected lines from *trans*-HCOOH towards both sources, we did not find lines from *cis*-HCOOH above the detection limit of these deep surveys. Using the MADEX excitation code, we derived lower limits to the *trans*-to-*cis* abundance ratio towards these sources. Below we summarize the main results from these observations:

Orion BN/KL hot core: the hot core is embedded in the Becklin-Neugebauer/Kleinmann-Low massive star-forming region, at $\sim 4'$ North-West from the Orion Bar, and $\sim 0.5'$ North-West from the Trapezium stars. Relatively narrow lines ($\Delta v_{\text{FWHM}} \approx 3 \text{ km s}^{-1}$) corresponding to a -type transitions of *trans*-HCOOH, with upper level energies up to $E_u/k \approx 300 \text{ K}$, are detected at a LSR velocity of $\sim 8 \text{ km s}^{-1}$. The observed line parameters are consistent with emission from the hot core itself. This is dense, n_{H} of a few 10^7 cm^{-3} , and hot gas at approximately 200 K (Blake et al. 1987; Tercero et al. 2010), and also from the more extended warm gas (approximately 60 K)

S. Cuadrado et al.: *Trans-cis* molecular photoswitching in interstellar space

in the ambient molecular cloud, the so-called the extended ridge (Blake et al. 1987; Tercero et al. 2010). Using MADEX and our accumulated knowledge of the source structure (see Tercero et al. 2010; Cernicharo et al. 2016, and references therein), we determine $T_{\text{rot}}(\text{trans}) = 100 \pm 35\text{K}$ and $N(\text{trans}) = (1.0-0.3) \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ in the hot core, and $T_{\text{rot}}(\text{trans}) = 40 \pm 15 \text{ K}$ and $N(\text{trans}) = (1.0-0.3) \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ in the extended ridge. We note that the extended ridge is the main cloud component responsible for the observed *trans*-HCOOH line emission in the 3 mm band. Although we obtain much higher *trans*-HCOOH column densities compared to the Orion Bar, lines from *cis*-HCOOH are not detected towards the hot core. Assuming $T_{\text{rot}}(\text{trans}) = T_{\text{rot}}(\text{cis})$, we compute a lower limit to the *trans*-to-*cis* abundance ratio of >100 in the hot core, and >30 in the extended ridge.

B1-b cold cloud: Barnard 1 is a low-mass star-forming region located in the Perseus cloud. The cold core B1-b harbors two submillimetre continuum sources (B1-bN and B1-bS) identified as first hydrostatic core candidates (Gerin et al. 2015), and B1b-W, an infrared source detected with *Spitzer* (Jørgensen et al. 2006). Complex organic molecules such as CH_3OCOH , CH_3SH , and CH_3O have been identified (Marcelino 2007; Öberg et al. 2010; Cernicharo et al. 2012). We detect nine lines from *trans*-HCOOH in the 3 mm band. A rotational diagram provides $T_{\text{rot}}(\text{trans}) = 12 \pm 4 \text{ K}$ and $N(\text{trans}) = (1.5 \pm 0.5) \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. Figure E.1 shows the detected lines together with our best model fit (red curve). Lines are very narrow ($\Delta v_{\text{FWHM}} \approx 0.5 \text{ km s}^{-1}$), consistent with emission from quiescent cold gas (approximately 20 K) shielded from FUV radiation. Although the inferred *trans*-HCOOH column density is similar to that obtained towards the Orion Bar, we do not detect lines from *cis*-HCOOH at the noise level of the B1-b data. Assuming $T_{\text{rot}}(\text{trans}) = T_{\text{rot}}(\text{cis})$, we determine a lower limit to the *trans*-to-*cis* abundance ratio of >60 . This is similar to that of the extended molecular Ridge of Orion, but significantly higher than towards the Bar.

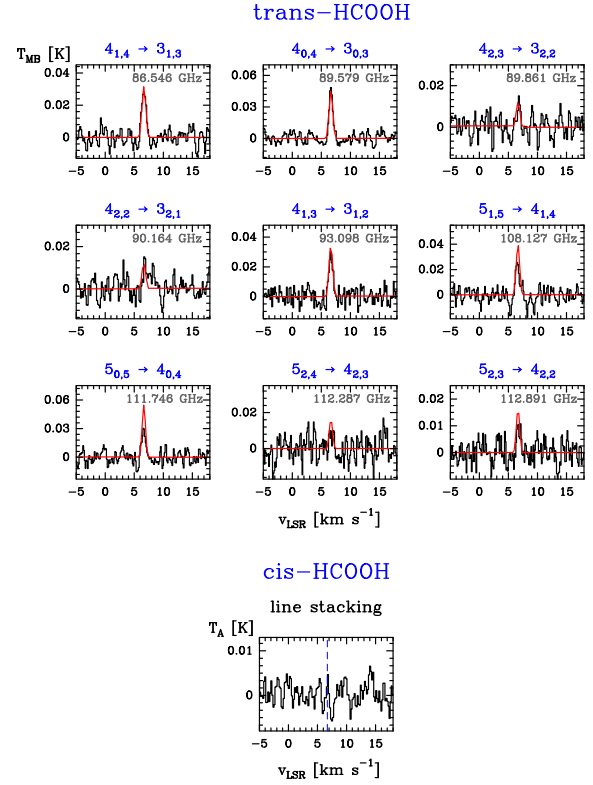


Fig. E.1. Detected *trans*-HCOOH rotational lines towards the cold cloud Barnard 1-b. The ordinate refers to the intensity scale in main beam temperature units and the abscissa to the Doppler velocity. Line frequencies (in GHz) are indicated at the top of each panel together with the rotational quantum numbers. The red curve shows an excitation model that reproduces the rotational population diagram. The *bottom* panel shows the stacked spectra for *cis*-HCOOH.

Appendix F: Detected *cis*- and *trans*-HCOOH lines towards the Orion Bar PDR

Table F.1. Line parameters for *cis*-HCOOH towards the Orion Bar, (+10'', -10'') position.

Transition (J_{K_a,K_c}) _u → (J_{K_a,K_c}) _l	Frequency [MHz]	E_u [K]	A_{ul} [s ⁻¹]	S_{ij}	g_u	$\int T_{\text{MB}} dv$ [mK km s ⁻¹]	v_{LSR} [km s ⁻¹]	Δv [km s ⁻¹]	T_{MB} [mK]	S/N
4 _{1,3} → 4 _{0,4}	82740.491	14.5	2.32×10^{-5}	4.3	9	18.9(2.3)	10.5(0.2)	1.8(0.4)	8.7	4.7
4 _{1,4} → 3 _{1,3}	85042.744	13.8	2.10×10^{-5}	3.7	9	15.3(3.5)	10.6(0.3)	2.1(0.5)	6.6	3.5
5 _{1,4} → 5 _{0,5}	86556.490	19.9	2.59×10^{-5}	5.1	11	26.3(3.5)	10.0(0.2)	2.4(0.4)	10.1	5.6
4 _{0,4} → 3 _{0,3}	87694.689	10.5	2.45×10^{-5}	4.0	9	26.6(2.3)	10.6(0.1)	2.0(0.2)	12.7	9.6
4 _{1,3} → 3 _{1,2}	90661.090	14.5	2.54×10^{-5}	3.7	9	21.2(2.4)	10.3(0.1)	1.8(0.3)	11.2	4.8
7 _{0,7} → 6 _{1,6}	90910.082	29.4	1.50×10^{-5}	3.5	15	10.9(2.4)	10.1(0.2)	1.5(0.4)	6.9	3.9
6 _{1,5} → 6 _{0,6}	91291.549	26.5	2.95×10^{-5}	5.9	13	20.1(3.5)	10.3(0.2)	2.5(0.6)	7.5	5.7
7 _{1,6} → 7 _{0,7}	97025.449	34.1	3.42×10^{-5}	6.6	15	15.5(2.4)	10.5(0.1)	1.8(0.3)	7.0	4.4
8 _{1,7} → 8 _{0,8}	103845.157	42.8	4.02×10^{-5}	7.1	17	20.5(3.6)	10.0(0.2)	1.6(0.2)	12.2	5.2
5 _{1,5} → 4 _{1,4}	106266.589	18.9	4.28×10^{-5}	4.8	11	22.2(2.4)	10.7(0.1)	1.8(0.3)	11.0	4.5
5 _{0,5} → 4 _{0,4}	109470.705	15.8	4.87×10^{-5}	5.0	11	35.7(3.6)	10.3(0.1)	1.8(0.2)	18.6	7.1
5 _{1,4} → 4 _{1,3}	113286.704	19.9	5.19×10^{-5}	4.8	11	39.6(5.3)	10.7(0.2)	1.9(0.3)	19.7	6.0

A&A 596, L1 (2016)

Table F.2. Line parameters for *trans*-HCOOH towards the Orion Bar, (+10'', -10'') position.

Transition (J_{K_a, K_c}) _u → (J_{K_a, K_c}) _l	Frequency [MHz]	E_u [K]	A_{ul} [s ⁻¹]	S_{ij}	g_u	$\int T_{MB} dv$ [mK km s ⁻¹]	v_{LSR} [km s ⁻¹]	Δv [km s ⁻¹]	T_{MB} [mK]	S/N
$4_{1,4} \rightarrow 3_{1,3}$	86546.180	13.6	6.35×10^{-6}	3.7	9	23.8(3.5)	10.4(0.1)	1.8(0.3)	13.7	7.0
$4_{0,4} \rightarrow 3_{0,3}$	89579.168	10.8	7.51×10^{-6}	4.0	9	27.9(4.7)	10.3(0.1)	1.8(0.2)	14.9	5.3
$4_{2,3} \rightarrow 3_{2,2}$	89861.473	23.5	5.69×10^{-6}	3.0	9	26.4(7.0)	10.0(0.4)	2.2(0.7)	11.3	3.0
$4_{1,3} \rightarrow 3_{1,2}$	93098.350	14.4	7.91×10^{-6}	3.7	9	26.3(2.4)	10.0(0.1)	2.2(0.2)	9.9	6.2
$5_{1,5} \rightarrow 4_{1,4}$	108126.709	18.8	1.30×10^{-5}	4.8	11	28.7(2.4)	10.2(0.1)	1.5(0.2)	14.0	8.3
$5_{0,5} \rightarrow 4_{0,4}$	111746.771	16.1	1.49×10^{-5}	5.0	11	27.9(3.6)	10.2(0.1)	1.7(0.3)	16.2	5.2
$5_{2,4} \rightarrow 4_{2,3}$	112287.131	28.9	1.27×10^{-5}	4.2	11	32.2(3.6)	10.7(0.1)	2.1(0.2)	14.2	6.1
$5_{3,3} \rightarrow 4_{3,2}$	112459.608	44.8	9.73×10^{-6}	3.2	11	9.1(3.6)	11.2(0.1)	0.5(0.4)	16.5	5.2
$5_{3,2} \rightarrow 4_{3,1}$	112466.993	44.8	9.73×10^{-6}	3.2	11	14.0(3.6)	10.1(0.3)	1.8(0.5)	7.3	2.8
$5_{4,2} \rightarrow 4_{4,1}$	112432.278	67.1	5.47×10^{-6}	1.8	11	} 24.9(6.1)	10.2(0.2)	1.6(0.4)	14.4	3.1
$5_{4,1} \rightarrow 4_{4,0}$	112432.305	67.1	5.47×10^{-6}	1.8	11					
$5_{2,3} \rightarrow 4_{2,2}$	112891.429	28.9	1.29×10^{-5}	4.2	11	29.2(3.6)	10.6(0.1)	2.0(0.2)	17.6	7.3

Capítulo 10

Iones Reactivos

10.1. Iones Reactivos en el Medio Interestelar

Los iones reactivos (e.g. CH^+ , SH^+ , HOC^+ , SO^+ , CO^+ , CF^+) son uno de los mejores trazadores de PDRs. Comparado con otras especies, los iones reactivos tienen un tiempo de vida muy corto ya que la escala de tiempo para que se produzcan colisiones reactivas con H_2 , H o e^- (las cuales dan lugar a una reacción química, y por lo tanto, a la destrucción de la molécula) es comparable o más corta que los tiempos típicos en los que se producen colisiones inelásticas (e.g. Nagy et al. 2013, Godard & Cernicharo 2013). Sin embargo, son especies abundantes en las superficies iluminadas y calientes de las PDRs. Esto es debido a que en estas regiones, el alto flujo de radiación FUV mantiene una alta abundancia de sus especies parentales (e.g. C^+ y S^+) y a que sus procesos de formación son muy eficientes.

A pesar de tener un tiempo de vida muy breve (algunos iones reactivos solo permanecen sin reaccionar unas pocas horas), estas especies pueden detectarse y utilizarse para investigar los procesos energéticos en el gas irradiado, ya sea circunestelar (e.g. Cernicharo et al. 1997), interestelar (e.g. Fuente et al. 2003) o protostelar (e.g. Benz et al. 2016).

Como ya se ha mencionado en la Sección 3.5, el hidrógeno vibracionalmente excitado (térmicamente o por absorción de fotones UV), H_2^* , juega un papel decisivo en la química de PDRs ya que desencadena una química característica en la que se pueden producir reacciones altamente endotérmicas y reacciones con grandes barreras de activación. La formación de iones reactivos como

CH^+ y SH^+ son un buen ejemplo. La reacción de formación del CH^+ , $\text{C}^+ + \text{H}_2(\text{v}) \rightarrow \text{CH}^+ + \text{H}$ es endotérmica por $\Delta E/k \simeq 4300 \text{ K}$ cuando el H_2 está en estado fundamental ($\text{v} = 0$), pero se vuelve exotérmica y rápida cuando el H_2 está vibracionalmente excitado ($\text{v} \geq 1$; e.g. Hierl et al. 1997, Agúndez et al. 2010). La principal reacción de formación del SH^+ , $\text{S}^+ + \text{H}_2(\text{v}) \rightarrow \text{SH}^+ + \text{H}$, es endotérmica por $\Delta E/k \simeq 9860 \text{ K}$ cuando el H_2 está en estado fundamental, pero se vuelve exotérmica para estados vibracionalmente excitados con $\text{v} \geq 2$ (e.g. Zanchet et al. 2013). Otros iones reactivos como CO^+ y HOC^+ (el isómero metaestable de HCO^+) se forman principalmente en reacciones a alta temperatura del C^+ con OH y H_2O , respectivamente (e.g. Sternberg & Dalgarno 1995, Hasegawa, Volk, & Kwok 2000). El HOC^+ también se forma mediante la reacción $\text{CO}^+ + \text{H}_2 \rightarrow \text{HOC}^+ + \text{H}$, por lo que, las abundancias de CO^+ y HOC^+ están probablemente relacionadas (Smith et al. 2002, Savage et al. 2000). El SO^+ se forma por reacción del S^+ con OH , por lo que también es abundante en las superficies iluminadas de las PDRs (e.g. Turner 1996). La formación del CF^+ tiene lugar a través de reacciones exotérmicas de C^+ con HF (el HF ha sido recientemente detectado con Herschel en la Barra de Orión; van der Tak et al. 2012) y se destruye mediante recombinaciones disociativas con electrones. Los modelos predicen que a medida que el campo de radiación FUV se atenúa hacia el interior de la nube, la abundancia de las especies parentales de los iones reactivos disminuye y por lo tanto su abundancia decrece

rápidamente a partir de $A_V > 1$.

El CH^+ fue una de las primeras moléculas y el primer ion reactivo que se detectó en el medio interestelar difuso (Douglas & Herzberg 1941). Se observa en abundancias moderadas en PDRs densas como la Barra de Orión ($\sim 10^{-9}$; Nagy et al. 2017) ya que el alto flujo de radiación FUV mantiene una alta abundancia tanto de C^+ como de H_2^* , haciendo que la reacción de formación sea eficiente. Sorprendentemente, tanto el CH^+ como el SH^+ , también se detectan en el medio difuso, donde la densidad es de tan solo 100 cm^{-3} (véase Gerin, Neufeld & Goicoechea 2016 para un artículo de revisión). Aunque en el medio difuso sí hay fotones FUV que formen C^+ y S^+ , no hay suficiente cantidad de H_2^* excitado radiativamente para formar de manera eficiente estos iones moleculares reactivos, y su formación sólo puede proceder a través de reacciones altamente endotérmicas que no pueden activarse con las bajas temperaturas del medio interestelar difuso. Para reproducir las abundancias observadas en el medio difuso, se ha propuesto que los choques (Pineau des Forêts et al. 1986) y la disipación de turbulencia en zonas muy localizadas (Godard et al. 2009, Falgarone et al. 2010a,b, Godard et al. 2012) puedan provocar un aumento local de la temperatura del gas lo que hace que tenga lugar una química en fase gas caliente en la que ambas especies se forman eficientemente.

Tanto el CO^+ (Latter et al. 1993), HOC^+ (Woods et al. 1983), CF^+ (Neufeld et al. 2006) y SO^+ (Turner 1992) se han detectado por sus transiciones rotacionales en el rango milimétrico desde radiotelescopios en tierra. El telescopio espacial Herschel, y en particular el espectrómetro heterodino HIFI, ha dado acceso a todo el dominio submilimétrico,

lo cual ha permitido la detección de muchas especies moleculares a través de sus transiciones rotacionales que no pudieron ser detectadas desde tierra debido a la alta opacidad de la atmósfera (e.g. H_2O^+ Ossenkopf et al. 2010; $^{36}\text{ArH}^+$, Barlow et al. 2013; ArH^+ Schilke 2014). Herschel también ha permitido la detección de las transiciones rotacionales fundamentales del CH^+ ($J = 1 \rightarrow 0, \dots, 6 \rightarrow 5$) y del SH^+ (componentes HFS de $N_J = 1_2 \rightarrow 0_1$) en PDRs densas (Nagy et al. 2013, Parikka et al. 2017). Aunque algunos de estos iones se han detectado en observaciones de baja resolución angular de nubes irradiadas con radiación UV cerca de estrellas masivas (e.g. Stoerzer et al. 1995, Apponi et al. 1999, Fuente et al. 2003, Treviño et al. 2017), hasta ahora no ha sido posible resolver espacialmente el frente de disociación de las PDRs donde tiene lugar la formación de estas especies, cuya extensión es de $\Delta A_V \lesssim 1 \text{ mag}$ (unos pocos segundos de arco en la Barra de Orión). Por lo tanto, la verdadera distribución espacial de la emisión de iones reactivos es en su mayoría desconocida.

En este Capítulo se realiza el análisis de los iones reactivos detectados en la Barra de Orión, tanto en el barrido espectral realizado con IRAM-30m como en los cartografiados realizados con ACA–ALMA. Se incluye el artículo de Müller et al. (2014), publicado en la revista A&A, donde se presenta la primera detección de líneas de emisión del ion reactivo SH^+ desde un observatorio terrestre (utilizando el radiotelescopio IRAM-30m y ALMA) y el artículo de Goicoechea et al. (2017), publicado en la revista A&A, donde se presentan las primeras imágenes en alta resolución angular de la emisión de iones reactivos (SH^+ , HOC^+ y SO^+) en el medio interestelar (utilizando el interferómetro ACA–ALMA).

10.2. Observaciones de CO^+ y CF^+ en la Barra de Orión

El CO^+ se detectó por primera vez en la región de formación estelar M17 SW (Latter et al. 1993). Desde entonces, el CO^+ se ha detectado en PDRs densas (e.g. la Barra de Orión: Störzer et al. 1995, Hogerheijde et al. 1995, Fuente et al. 2003; MonR2: Rizzo et al. 2003, Ginard et al. 2012, Treviño-Morales 2016; S140: Savage & Ziurys 2004), nebulosas de reflexión (e.g. NGC 7023; Fuente & Martín Pin-
tado, 1997), nebulosas planetarias (e.g. NGC7027; Latter et

al. 1993), protoestrellas (e.g. IRAS16293-2422; Ceccarelli et al. 1997, Stäuber et al. 2007) e incluso en galaxias (M82; Fuente et al. 2006). El CF^+ se ha detectado en PDRs densas como la Barra de Orión (Neufeld et al. 2006) y Cabeza de Caballo (Guzmán et al. 2012), y en regiones de formación estelar (e.g. DR21(OH) y W51, Kalenskii & Johansson 2010a,b).

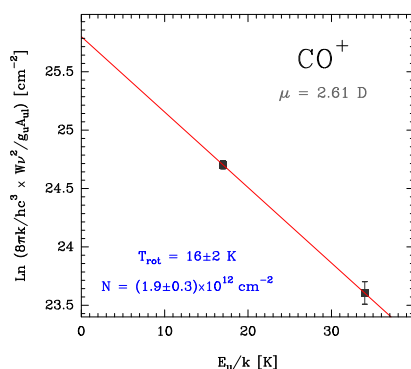


Figura 10.1: Diagrama de rotación del ion reactivo CO^+ detectado en el frente de disociación de la Barra de Orión. Se indica la temperatura rotacional, T_{rot} , y la densidad de columna, N .

En el barrido espectral del frente de disociación de la Barra de Orión (ver Capítulo 5) se han detectado cinco líneas del ion reactivo CO^+ (con una relación $S/N > 5$) y dos líneas rotacionales del CF^+ (con una relación $S/N > 10$) en el barrido espectral de la Barra de Orión. Las líneas detectadas de CO^+ se corresponden con tres líneas de estructura fina (FS) de la transición $N = 2 \rightarrow 1$ ($E_u/k = 17$ K) y dos líneas FS de la transición $N = 3 \rightarrow 2$ ($E_u/k = 34$ K). Las dos líneas detectadas de CF^+ se corresponden con las transiciones rotacionales de menor energía de la molécula, $J = 1 \rightarrow 0$ ($E_u/k = 4.9$ K) y $J = 2 \rightarrow 1$ ($E_u/k = 14.8$ K).

Estas líneas se han ajustado con perfiles Gaussianos usando el software CLASS para obtener sus intensidades integradas de línea, anchuras, velocidades LSR y temperaturas de antena (ver Tabla 10.1 y 10.5). Las líneas son estrechas ($\Delta v \simeq 1.9 - 2.9$ km s $^{-1}$) y tienen una velocidad LSR entre $v_{\text{LSR}} = 10.5 - 10.7$ km s $^{-1}$, que se corresponde con la velocidad de la Barra.

La temperatura rotacional y densidad de columna del CO^+ se han calculado a partir de su diagrama de rotación. Para ello, cada transición rotacional se ha descrito con un único número cuántico de rotación N , es decir, sin desdoblamientos. La intensidad integrada, la degeneración de nivel y la fuerza de línea de cada transición se ha calculado como el sumatorio de todas las componentes finas permitidas de cada transición $N + 1 \rightarrow N$. La frecuencia característica se ha calculado con la media ponderada con la fuerza relativa de cada línea. Con estos valores se ha determinado el coeficiente de Einstein de cada transición.

El diagramas de rotación (ver Sección 4.1) se ha calculado para dos casos límite: (i) suponiendo que la emisión es extensa (llenado uniforme del haz del telescopio) con $\eta_{\text{bf}} = 1$ ($T_{\text{rot}} = 16 \pm 2$ K y $N = (1.9 \pm 0.3) \times 10^{12}$ cm $^{-2}$),

y (ii) suponiendo que la fuente tiene un tamaño de $\theta_s = 9''$ (fuente semi-extensa), que se corresponde con el tamaño del haz del telescopio IRAM-30m a ~ 1 mm ($T_{\text{rot}} = 12 \pm 2$ K y $N = (4.9 \pm 0.7) \times 10^{12}$ cm $^{-2}$). El diagrama de rotación resultante (considerando emisión extensa) se muestra en la Fig. 10.1. La abundancia del CO^+ es de $N(\text{CO}^+)/N_{\text{H}} = (3.0 - 7.7) \times 10^{-11}$, similar a la obtenida en anteriores observaciones del frente de disociación de la Barra (Störzer et al. 1995, Fuente et al. 2003).

La línea de CF^+ $J = 2 \rightarrow 1$ está solapada con la línea de A-CH $_3$ CHO $J_{K_a, K_c} = 11_{1,11} \rightarrow 10_{1,10}$, por lo que la intensidad observada de la línea es mayor que la que le correspondería sólo a la línea de CF^+ $J = 2 \rightarrow 1$. Con solo dos líneas detectadas y una de ellas contaminada con la emisión de otra especie, el diagrama rotacional del CF^+ no ha sido concluyente. Estas dos líneas (junto con la transición $J = 3 \rightarrow 2$) ya habían sido detectadas previamente en la Barra de Orión por Neufeld et al. (2006) en una posición muy cercana a la de nuestro barrido espectral (a unos pocos segundos de arco de distancia). Nagy et al. (2013) detectaron con Herschel/HIFI la transición $J = 5 \rightarrow 4$ ($E_u/k = 73.8$ K) a 512.8 GHz y calcularon la temperatura rotacional ($T_{\text{rot}} = 32$ K) y densidad de columna ($N = 2.1 \times 10^{12}$ cm $^{-2}$) de esta especie con las observaciones de Neufeld et al. (2006).

Para confirmar los resultados obtenidos del diagrama rotacional así como la correcta identificación de las líneas, se ha modelado el espectro de los dos iones usando el código de transferencia radiativa MADEX (ver Sección 4.2) asumiendo una distribución de Boltzmann y una temperatura de excitación para la población de niveles rotacionales (ver Sección 10.5). El modelo para CO^+ con los resultados obtenidos del diagrama de rotación sí reproduce las observaciones, en cambio, el modelo para

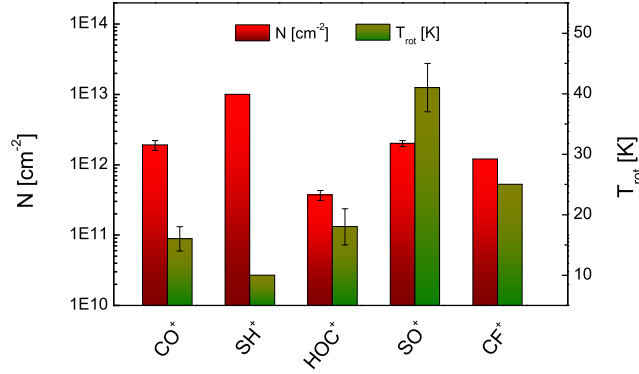


Figura 10.2: Densidades de columna (histograma verde; eje izquierdo) y temperaturas rotacionales (histograma rojo; eje derecho) de los iones reactivos detectados en el frente de disociación de Barra de Orión.

CF^+ con los resultados de Nagy et al. 2013 ($T_{\text{rot}} = 32$ K y $N = 2.1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$) no reproduce nuestras observaciones (Fig. 10.7, modelo rojo). Aunque el modelo reproduce la línea $J = 2 \rightarrow 1$ (recordar que está solapada con A- CH_3CHO $J_{K_a, K_c} = 11_{1,11} \rightarrow 10_{1,10}$), sobrestima la intensidad de la línea $J = 1 \rightarrow 0$. Suponiendo una temperatu-

ra rotacional de $T_{\text{rot}} = 20 - 30$ K, el modelo que mejor reproduce las observaciones tiene una densidad de columna de $N = (1.0 - 1.4) \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ (Fig. 10.7, modelo verde y rosa, respectivamente). Se ha calculado una abundancia del ion reactivo CF^+ en el frente de disociación de la Barra de Orión de $N(\text{CF}^+)/N_{\text{H}} = (1.6 - 2.2) \times 10^{-11}$.

10.3. Müller et al. 2014 (A&A)

Se ha utilizado el interferómetro ALMA y el radiotelescopio IRAM-30m para buscar las líneas de rotación más bajas en frecuencia (~ 346 GHz) y energía ($E_u/k = 16.6$ K) del ion reactivo SH^+ en el frente de disociación de la Barra de Orión, posición consistente con la rutas de formación del ion reactivo SH^+ en PDRs ($\text{S}^+ + \text{H}_2(\text{v}) \rightarrow \text{SH}^+ + \text{H}$, con $\text{v} \geq 2$). Sobre la base de anteriores observaciones de SH^+ en la Barra de Orión realizadas con el telescopio espacial Herschel/HIFI (Nagy et al. 2013), se esperaba detectar las dos componentes de estructura hiperfina de la transición de estructura fina $N_J = 1_2 \rightarrow 0_1$ cerca de 346 GHz (Savage et al. 2004). Observaciones previas de estas dos transiciones de estructura hiperfina en regiones de formación estelar y protoestrellas masivas (Menten et al. 2011; Stäuber et al. 2007) no mostraron la detección de dichas líneas. Nuestros espectros, tanto de IRAM-30m como de ACA y ALMA, no mostraron ninguna línea de emisión en las frecuencias predichas a partir de los datos de laboratorio (Savage et al. 2004). Sin embargo, se detectaron dos líneas de emisión a 345858.27 MHz y 345944.35 MHz (detectadas a $\sim 6\sigma$ y $\sim 12\sigma$ por encima del ruido, respectivamente), cada

una de ellas a ~ 15 MHz ($\sim 13 \text{ km s}^{-1}$) a frecuencias más altas con respecto a las frecuencias predichas y con un cociente de intensidad 1:2 (el esperado para esta especie), por lo que estas dos líneas han sido asignadas a las transiciones rotacionales de menor frecuencia del ion reactivo SH^+ ($N, J, F = 1, 0, 1/2 \rightarrow 0, 1, 1/2$ y $1, 0, 1/2 \rightarrow 0, 1, 3/2$). Ninguna de estas dos líneas coincide en frecuencia con transiciones de moléculas abundantes presentes en la Barra, ni con ninguna otra línea en catálogos espectroscópicos (JPL, CDMS o MADEX). Con el objetivo de probar la viabilidad de estas asignaciones, se colaboró con espectroscopistas de la Universidad de Colonia (Alemania) y se llevó a cabo la corrección de los parámetros espectroscópicos y la nueva determinación de las frecuencias de las líneas rotacionales del ion reactivo SH^+ a partir de nuestras observaciones. Posteriormente a la publicación estos resultados, este ion reactivo se ha vuelto a estudiar en el laboratorio confirmando nuestras detecciones y cálculos espectroscópicos (Halfen & Ziurys 2015). Las predicciones actualizadas del espectro de rotación de SH^+ están disponibles en el catálogo CDMS¹.

¹<http://www.astro.uni-koeln.de/cgi-bin/cdmsinfo?file=e033505.cat>

A&A 569, L5 (2014)
 DOI: [10.1051/0004-6361/201424756](https://doi.org/10.1051/0004-6361/201424756)
 © ESO 2014

**Astronomy
&
Astrophysics**

L E

Revised spectroscopic parameters of SH⁺ from ALMA[★] and IRAM 30 m^{★★} observations^{★★★}

Holger S. P. Müller¹, Javier R. Goicoechea², José Cernicharo², Marcelino Agúndez², Jérôme Pety^{3,4}, Sara Cuadrado^{2,5}, Maryvonne Gerin⁴, Gaëlle Dumas³, and Edwige Chapillon^{3,6,7}

¹ I. Physikalisches Institut, Universität zu Köln, Zùlpicher Str. 77, 50937 Köln, Germany
 e-mail: hspm@ph1.uni-koeln.de

² Instituto de Ciencias de Materiales de Madrid (CSIC), 28049 Cantoblanco, Madrid, Spain.

³ IRAM, 300 rue de la Piscine, 38406 Saint Martin d'Hères, France

⁴ CNRS UMR 8112, LERMA, Observatoire de Paris, École Normale Supérieure and Université Pierre et Marie Curie, 75014 Paris, France

⁵ Centro de Astrobiología (CSIC-INTA), Carretera de Ajalvir km 4, 28850 Torrejón de Ardoz, Madrid, Spain

⁶ CNRS, LAB, UMR 5804, 33270 Floirac, France

⁷ Université de Bordeaux, LAB, UMR 5804, 33270 Floirac, France

Received 5 August 2014 / Accepted 3 September 2014

ABSTRACT

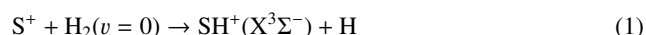
Hydrides represent the first steps of interstellar chemistry. Sulfanylium (SH⁺), in particular, is a key tracer of energetic processes. We used ALMA and the IRAM 30 m telescope to search for the lowest frequency rotational lines of SH⁺ toward the Orion Bar, the prototypical photo-dissociation region illuminated by a strong UV radiation field. On the basis of previous *Herschel*/HIFI observations of SH⁺, we expected to detect emission of the two SH⁺ hyperfine structure (HFS) components of the $N_J = 1_0-0_1$ fine structure (FS) component near 346 GHz. While we did not observe any lines at the frequencies predicted from laboratory data, we detected two emission lines, each ~15 MHz above the SH⁺ predictions and with relative intensities and HFS splitting expected for SH⁺. The rest frequencies of the two newly detected lines are more compatible with the remainder of the SH⁺ laboratory data than the single line measured in the laboratory near 346 GHz and previously attributed to SH⁺. Therefore, we assign these new features to the two SH⁺ HFS components of the $N_J = 1_0-0_1$ FS component and re-determine its spectroscopic parameters, which will be useful for future observations of SH⁺, in particular if its lowest frequency FS components are studied. Our observations demonstrate the suitability of these lines for SH⁺ searches at frequencies easily accessible from the ground.

Key words. molecular data – line: identification – ISM: molecules – radio lines: ISM – ISM: individual objects: Orion Bar

1. Introduction

Hydrides, which consist of one heavy atom and one or more H atoms, are of fundamental importance in the interstellar medium (ISM). Unfortunately, their fundamental transitions at submillimeter (sub-mm) wavelengths are often difficult to observe from the ground. The *Herschel* Space Observatory and the Stratospheric Observatory for Infrared Astronomy (SOFIA) have increased our knowledge about hydrides in space considerably. Recent detections include ArH⁺ with *Herschel* (Barlow et al. 2013; Schilke et al. 2014) and SH with SOFIA (Neufeld et al. 2012).

The reactive molecular ion SH⁺ (sulfanylium) is an interesting probe of energetic processes in the ISM. In particular, SH⁺ is only detectable in significant amounts if the very high endothermicity (0.86 eV or ~9860 K) of the gas-phase reaction



can be overcome. Using the Atacama Pathfinder EXperiment (APEX) 12 m telescope, Menten et al. (2011) discovered recently sub-mm SH⁺ absorption lines in the envelope of the prolific star-forming region Sagittarius B2(M), Sgr B2(M) for short, a very strong continuum source close to the Galactic center, and in the diffuse interstellar clouds on the line of sight toward this source. The ubiquity of SH⁺ in diffuse clouds was re-emphasized soon thereafter by *Herschel*/HIFI observations toward several Galactic sight lines by Godard et al. (2012). These authors proposed that the required energy for reaction (1) arises from turbulent dissipation, shocks, or shears in these very low density clouds. Sub-mm SH⁺ emission lines were also detected by *Herschel* in higher density environments such as the high-mass star-forming region W3 IRS5 (Benz et al. 2010) or the Orion Bar photo-dissociation region (PDR; Nagy et al. 2013). These are strongly UV-irradiated environments where the gas attains high temperatures ($\lesssim 1000$ K) and where H₂ molecules are

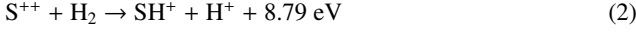
* This paper makes use of the following ALMA data: ADS/JAO.ALMA#2012.1.00352.S. ALMA is a partnership of ESO (representing its member states), NSF (USA) and NINS (Japan), together with NRC (Canada) and NSC and ASIAA (Taiwan), in cooperation with the Republic of Chile. The Joint ALMA Observatory is operated by ESO, AUI/NRAO and NAOJ.

** This paper makes use of observations obtained with the IRAM 30 m telescope. IRAM is supported by INSU/CNRS (France), MPG (Germany), and IGN (Spain).

*** Appendix A is available in electronic form at <http://www.aanda.org>

A&A 569, L5 (2014)

UV-pumped to vibrationally excited states. In addition, in these PDR environments, reaction (1) becomes exothermic when H_2 molecules are in the $v = 2$ or higher vibrational levels, thus enhancing the SH^+ abundance (e.g., Zanchet et al. 2013). Finally, if doubly ionized sulfur atoms co-exist with H_2 molecules in X-ray dissociation regions (XDRs), such as Galactic center clouds (e.g., Godard et al. 2012; Etzaluze et al. 2013), the very exothermic reaction



can be a significant source of SH^+ (e.g., Abel et al. 2008).

The strongest ground state FS component of $\text{SH}^+(\text{X}^3\Sigma^-)$ at $\sim 526 \text{ GHz}$ ($N_J = 1_2 - 0_1$) cannot be observed from the ground because of the water in Earth's atmosphere. The $\sim 683 \text{ GHz}$ ($N_J = 1_1 - 0_1$) and $\sim 893 \text{ GHz}$ ($N_J = 2_1 - 1_1$) transitions can be observed from the ground, albeit with some difficulty. Transitions of the $N_J = 1_0 - 0_1$ FS component at $\sim 346 \text{ GHz}$ (Savage et al. 2004) lie in a more accessible frequency window. Indeed, Menten et al. (2011) searched for the SH^+ ~ 346 , ~ 683 , and $\sim 893 \text{ GHz}$ absorption lines toward Sgr B2(M). Unfortunately, the $\sim 346 \text{ GHz}$ lines are heavily blended with absorption components of the nearby $\text{CO } J = 3-2$ line caused by Milky Way spiral arm molecular clouds. Stäuber et al. (2007) detected an emission feature at $345\,930 \text{ MHz}$ in the massive protostar AFGL 2591, but it may be caused by $^{34}\text{SO}_2$, a common species in these sources, so they could not draw firm conclusions about SH^+ . Leurini et al. (2006) presented first the results of a 1 mm line survey toward the Orion Bar with the APEX 12 m telescope. They did not report the detection of SH^+ . However, they observed the denser HCN clump (Lis & Schilke 2003) and not the most exposed UV-irradiated PDR gas layers where SH^+ is expected.

In this letter we present the first ground-based detection of SH^+ lines toward the Orion Bar CO^+ peak (Stoerzer et al. 1995; Goicoechea et al. 2011, and references therein). We show that the previously reported $\text{SH}^+ N_J = 1_0 - 0_1$ line frequencies at $\sim 346 \text{ GHz}$ are not correct and use the frequencies derived from our observations to compute improved SH^+ spectroscopic parameters and line frequencies.

2. Observations

2.1. Single-dish IRAM 30 m observations

IRAM 30 m telescope observations were taken in 2013 using the EMIR330 receiver and the FFTS backend in the wide mode that covers a 16 GHz instantaneous bandwidth per polarization at a channel spacing of 195 kHz . They are part of a complete millimeter line survey toward the Orion Bar dissociation front (Cuadrado et al. 2014) and include specific deep integration searches for $\text{SH}^+ N_J = 1_0 - 0_1$ lines. The target position is at $\alpha_{2000} = 05^{\text{h}}35^{\text{m}}20.8^{\text{s}}$, $\delta_{2000} = -05^{\circ}25'17.0''$, close to the so-called CO^+ peak (Stoerzer et al. 1995). The observing procedure was position switching (PSW) with the reference position located at a $(-600'', 0'')$ offset to avoid the extended molecular emission from the Orion Molecular Cloud. The antenna temperature, T_{A}^* , was converted to the main beam temperature, T_{MB} , using an antenna efficiency of 42% . At this frequency, the IRAM 30 m telescope provides an angular resolution of $7''$. Figure 1 (top panel) shows the resulting spectrum between 345.8 GHz and 345.9 GHz after baseline subtraction. The integration time was 2 h , and the rms noise was $\sim 30 \text{ mK}$ per channel. The angular resolution and sensitivity of these observations are a factor of ~ 2.5 better than those of Leurini et al. (2006). Atmospheric calibration of the IRAM 30 m data was carried out

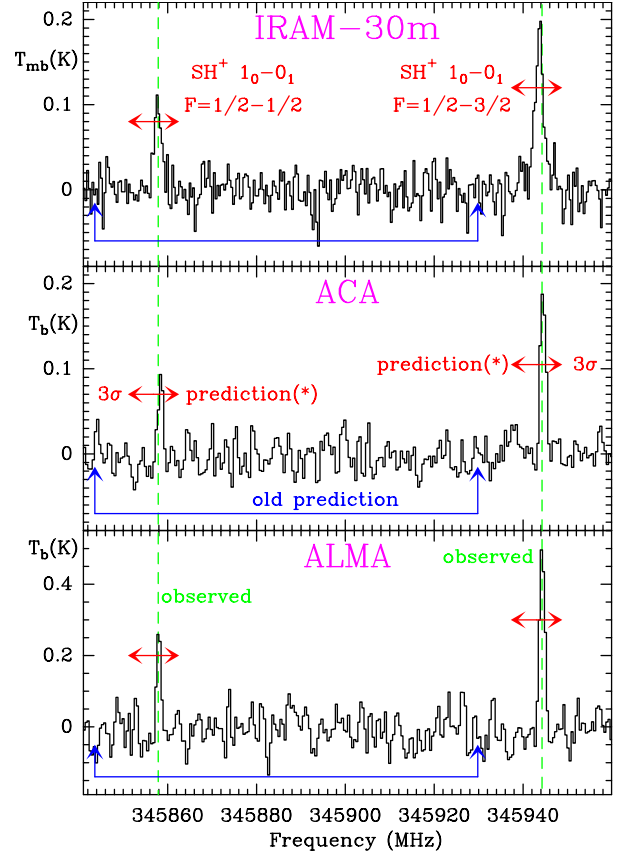


Fig. 1. From top to bottom: IRAM 30 m, ACA, and ALMA spectra toward the Orion Bar between 345.8 GHz and 345.9 GHz . Blue arrows show the predicted frequencies of the $\text{SH}^+ N_J = 1_0 - 0_1$, $F = 1/2 - 1/2$ and $F = 1/2 - 3/2$ lines before this work (based on experiments by Savage et al. 2004). Red arrows (prediction*) show the expected line frequencies for a Hamiltonian fit that excludes the $345\,929.8 \text{ MHz}$ line observed by Savage et al. (2004) and attributed to SH^+ ; see Sect. 4.

with the ATM program (Cernicharo 1985, IRAM internal report; Pardo et al. 2001).

2.2. Interferometric ALMA and ACA observations

Atacama Large Millimeter Array (ALMA) observations of the Orion Bar were carried out in 2013 and 2014 during ALMA Cycle 1 observations. They belong to the 2012.1.00352.S project “The fundamental structure of molecular cloud edges: from clumps to photoevaporation” (P.I.: Goicoechea). They consist of mosaicking observations covering a $\sim 40'' \times 40''$ field centered at $\alpha_{2000} = 05^{\text{h}}35^{\text{m}}20.6^{\text{s}}$, $\delta_{2000} = -05^{\circ}25'20.0''$.

The ALMA array observations used twenty-seven 12 m antennas. The field of view was observed as a mosaic of 27 Nyquist-sampled pointings in the C32-2 configuration, providing a typical resolution of $\sim 1''$. Observations were carried out with the band 7 receiver near 346 GHz using the ALMA correlator backend at a spectral resolution of 488.3 kHz ($\sim 0.4 \text{ km s}^{-1}$) over a total bandwidth of 937.5 MHz . Atacama Compact Array (ACA) is used to complement ALMA observations of extended sources by producing short-spacing visibilities filtered out by the ALMA array. At the time of observations, the ACA array used nine 7 m antennas. The ACA mosaic contained ten pointings Nyquist-sampled fields and provided a typical resolution

of $\sim 3.6''$. The total observing time was about 6.5 h and 2.2 h for ACA and ALMA observations respectively. The data were calibrated within the CASA software package using the standard algorithms. The calibrated uv tables were then exported to GILDAS¹, where the data were deconvolved using the Högbom CLEAN algorithm. All technical details on the data reduction and the complete data set will be presented elsewhere. For the purpose of this work (showing the 345.8–345.9 GHz window observed by different instrumentation) we only deconvolved the ACA and ALMA visibilities separately.

3. Observational results

Figure 1 shows, from top to bottom, the IRAM 30 m, ACA, and ALMA spectra toward the Orion Bar dissociation front; we note that ACA and ALMA spectra are averaged over the same region of the dissociation front. The abscissa axis represents the rest frequency (in MHz) using a local standard of rest velocity (v_{LSR}) of 10.50 km s^{-1} . We derived this v_{LSR} value from the accurately known HCO⁺ $J = 4-3$ line frequency² observed in the same region of the dissociation front. It agrees, within $\sim 0.2 \text{ km s}^{-1}$, with typical velocity centroids of other reactive molecular ions observed with single-dish telescopes toward the Orion Bar (see, e.g., Fuente et al. 2003; Leurini et al. 2006; Nagy et al. 2013).

We expected to detect the SH⁺ $F = 1/2-1/2$ and $F = 1/2-3/2$ HFS lines of the $N_J = 1_0-0_1$ FS component near 346 GHz on the basis of the previous Herschel/HIFI detection of the higher energy SH⁺ $N_J = 1_2-0_1$ lines at $\sim 526 \text{ GHz}$ toward the Orion Bar (Nagy et al. 2013). Blue arrows in Fig. 1 show the absence of emission at frequencies derived from previous laboratory data of Savage et al. (2004) for all three telescopes. Our spectra, however, show two emission lines shifted by $\sim 15 \text{ MHz}$ ($\sim 13 \text{ km s}^{-1}$) to higher frequencies with respect to the frequencies indicated by blue arrows, which could not be assigned to other carriers in the MADEX, CDMS (Müller et al. 2001, 2005), and JPL (Pickett et al. 1998) spectroscopic catalogs. Table A.1 shows results from Gaussian fits to the two lines, which were detected with up to 12σ and 7σ significance levels. Averaging the three observations, we obtain 345 944.35 MHz and 345 858.27 MHz for the two lines. Given the complex gas kinematics in Orion, implying an uncertainty in v_{LSR} , we adopted a 1σ systematic uncertainty of 0.2 MHz for the rest frequency determination. We note that the line near 345.9 GHz is only $\sim 61 \text{ MHz}$ ($\sim 53 \text{ km s}^{-1}$) above the CO $J = 3-2$ line frequency.

4. New SH⁺ spectroscopic parameters

The two unpaired electrons ($S = 1$) of sulfanylium lead to a $^3\Sigma^-$ electronic ground state which causes all rotational levels N to be split into three with $J = N, N \pm 1$, except for the $N = 0$ level for which only $J = 1$ exists. The lowest order FS parameters are λ and γ which describe the (electron) spin-spin coupling and the (electron) spin-rotation coupling. Rotational (or centrifugal distortion) and vibrational corrections, the latter for excited vibrational states, may appear in the Hamiltonian. The proton magnetic moment ($I_H = 1/2$) splits every FS level into two HFS levels. The main HFS parameters here are b_F and c , the scalar and tensorial electron spin-nuclear spin coupling parameters.

The selection rules $\Delta F = 0, \pm 1$ hold strictly. The spin-conserving transitions ($\Delta F = \Delta J = \Delta N$) are the strongest ones at higher quantum numbers. Other transitions have non-negligible intensities, in particular at low- N . The $N = 1-0$ ground state rotational transition is split into three FS components $J = 0-1$, $2-1$, and $1-1$ near 346, 526, and 683 GHz, respectively, which are split further into 2, 3, and 4 HFS components. An energy level diagram is shown, e.g., in Menten et al. (2011).

The rotation-vibration spectrum of SH⁺ was recorded up to $v = 2-1$ (Brown et al. 1986) and $v = 4-3$ (Civiš et al. 1989). Hovde & Saykally (1987) investigated the rotational spectrum of SH⁺ in its ground and first excited vibrational state between 0.51 THz and 1.62 THz by laser magnetic resonance (LMR). More recently, Savage et al. (2004) employed source- and velocity-modulation to determine accurate rest frequencies of all three HFS components near 526 GHz of the $N = 1-0$ transition of SH⁺ as well as one of two HFS components near 346 GHz. In each of these four studies, spectroscopic parameters were determined only from their own data. In contrast, Brown & Müller (2009) used the field-dependent (Hovde & Saykally 1987) and field-free (Savage et al. 2004) rotational data as well as the rovibrational data of the fundamental ($v = 1-0$) band (Brown et al. 1986; Civiš et al. 1989) to determine ground state spectroscopic parameters as well as vibrational corrections if they were needed. One of the present authors (HSPM) used a slightly different approach to create an entry for the CDMS catalog because the SPFIT program (Pickett 1991) does not permit the use of field-dependent data. The LMR transition frequencies extrapolated to zero field by Brown & Müller (2009) were fit together with the field-free rotational data (Savage et al. 2004) and all of the rovibrational data (Brown et al. 1986; Civiš et al. 1989) to determine Dunham-type parameters $P_{i,j}$ for SH⁺, with i and j indicating vibrational and rotational corrections, respectively.

Savage et al. (2004) observed all three HFS components of the $N_J = 1_2-0_1$ transition of sulfanylium (around 526.1 GHz) between 0.2 MHz and 0.5 MHz higher than calculated from the parameters of the LMR study (Hovde & Saykally 1987); the deviations are well within the uncertainties of $\sim 1.6 \text{ MHz}$ from that study. These rest frequencies improve the accuracies of the major HFS parameters b_F and c , as well as the origin of the FS component, which depends on several rotational and fine structure parameters. The $F = 1/2-3/2$ HFS component was found by Savage et al. (2004) only 1.23 MHz higher than calculated from parameters in Hovde & Saykally (1987), well within the uncertainty of $\sim 18 \text{ MHz}$. The uncertainty is much larger because this FS component was not accessed in the LMR study. The associated $F = 1/2-1/2$ HFS component, weaker by a factor of two, was not detected despite significant signal averaging. Its frequency, $\sim 86 \text{ MHz}$ lower than the $F = 1/2-3/2$ HFS component, is well constrained by the frequency of this HFS component and from the data near 526.1 GHz.

As outlined in Sect. 3, no emission lines were detected in the Orion Bar at the frequencies expected from Savage et al. (2004). However, the two emission lines, each observed $\sim 15 \text{ MHz}$ higher, had the expected 1:2 intensity ratio and spacing required to assign them to the $N_J = 1_2-0_1$ FS component. In order to test the feasibility of these assignments, we omitted the laboratory transition frequency near 346 GHz from the data set which was used to create the CDMS catalog entry. Interestingly, the rms error of the fit improved significantly from 0.898 to 0.826. More importantly, the two HFS components were now predicted at 345 856.8 MHz and at 345 943.0 MHz, very close to our observed emission lines (Fig. 1) and each with predicted 1σ uncertainties of 3.9 MHz. These uncertainties are

¹ See <http://www.iram.fr/IRAMFR/GILDAS>

² We used $\nu(\text{HCO}^+ 4-3) = 356\,734.2244(9) \text{ MHz}$. All publicly available rotational lines up to $J = 17$ and with uncertainties below 50 kHz (Tinti et al. 2007; Buffa et al. 2006; Hirao et al. 2008; Cazzoli et al. 2012) were used to compute HCO⁺ line frequencies with MADEX (Cernicharo 2012). The residual of the fit is 39 kHz.

A&A 569, L5 (2014)

Table 1. Spectroscopic parameters^a (MHz, cm⁻¹) of sulfanylium, SH⁺.

Parameter	Value
Y_{10}^b	2 547.4948 (104)
Y_{20}^b	-49.4293 (90)
Y_{30}^b	0.2097 (30)
$Y_{40} \times 10^{3b}$	-16.01 (34)
Y_{01}	278 094.99 (36)
Y_{11}	-8577.33 (85)
Y_{21}	16.15 (32)
Y_{02}	-14.7380 (76)
$Y_{12} \times 10^3$	122.9 (27)
$Y_{03} \times 10^3$	0.46 ^c
λ_{00}	171 488.3 (58)
λ_{10}	-471.8 (146)
λ_{20}	-79.1 (67)
λ_{01}	-1.13 (24)
γ_{00}	-5036.29 (91)
γ_{10}	116.4 (20)
γ_{20}	3.52 (64)
γ_{01}	0.432 (35)
$b_{F,0}(^1\text{H})$	-56.884 (81)
$b_{F,1}(^1\text{H}) - b_{F,0}(^1\text{H})$	-3.46 (79)
$c(^1\text{H})$	33.60 (67)

Notes. ^(a) Numbers in parentheses are one standard deviation in units of the least significant digits. ^(b) In units of cm⁻¹. ^(c) Kept fixed to the value derived by Brown & Müller (2009).

considerably smaller than those from Hovde & Saykally (1987), mainly because of the extensive rovibrational transition frequencies used in the present fit and because of the remaining data from Savage et al. (2004). Hence, we used averages over the three independent observations given in Sect. 3 to redetermine the SH⁺ spectroscopic parameters. The resulting parameters are given in Table 1. The rms error of this fit is 0.820, demonstrating that our transition frequencies are more compatible with the remainder of the laboratory data than the single frequency near 346 GHz determined by Savage et al. (2004). Updated predictions of the rotational spectrum of SH⁺ will be available in the CDMS catalog³. Data up to 1 THz are given in Table A.2.

Errors in rest frequencies determined in the laboratory or through astronomical observations are known to occur especially in sparse data sets. Recent error correction of data pertaining to astrophysically important hydrides include the correction of the fundamental transition of H₂D⁺ (Asvany et al. 2008) and of the fundamental transitions of CH⁺ isotopologues (Amano 2010).

The changes in spectroscopic parameters are small for the most part and occur predominantly in rotational and FS parameters. The most significant changes of 3σ occur in $Y_{01} \approx B_e$ and $Y_{02} \approx -D_e$. The largest change in magnitude occurs in λ_{00} , but corresponds only to $\sim 1\sigma$. The strong, spin-conserving transitions are only slightly affected at lower frequencies. In addition, the transitions of the $N_J = 1_1-0_1$ FS component (~ 683 GHz) are now predicted 2 MHz lower than in the first SH⁺ CDMS catalog entry. Changes from the predictions by Brown & Müller (2009) are a bit more complex, but deviate on average by ~ 2 MHz. Larger deviations of several megahertz may occur for transitions with flip of the electron spin (e.g., at ~ 893 GHz) or at higher frequencies.

The 345 929.8 MHz line observed in the laboratory, and attributed to SH⁺, $N_J = 1_0-0_1$, $F = 1/2-3/2$ by Savage et al. (2004), is not detected at the sensitivity limit of our observations. Here we demonstrate that the 345 929.8 MHz line is not SH⁺, and we improve the SH⁺ spectroscopic parameters with the detection of the 345 944 and 345 858 MHz lines, which arise from the edge of the Orion Bar, consistent with the expected SH⁺ formation route in PDRs, the reaction of S⁺ with vibrationally excited H₂ (e.g., Nagy et al. 2013; Zanchet et al. 2013). Nevertheless, it may still be useful to reinvestigate the $N = 1-0$ transition of SH⁺ in the laboratory using methods such as those by Savage et al. (2004); Asvany et al. (2008); Amano (2010); Brünken et al. (2014), in particular in combination with a study of ³⁴SH⁺.

Acknowledgements. We thank the Spanish MINECO for funding support under grants CSD2009-00038, AYA2009-07304, and AYA2012-32032. We thank the European Research Council for funding support under ERC-2013-Syg 610256-NANOCOSMOS. H.S.P.M. is supported by the German Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF) via the ALMA Regional Center (ARC) Node project 5A11PK3 for maintenance and upgrade of the CDMS. J.R.G. thanks the Observatoire de Paris/ENS and IRAM (Grenoble) where part of this work was carried out. S.C. was supported by a FPI-INTA grant.

References

- Abel, N. P., Federman, S. R., & Stancil, P. C. 2008, *ApJ*, 675, L81
Amano, T. 2010, *ApJ*, 716, L1
Asvany, O., Ricken, O., Müller, H. S. P., et al. 2008, *Phys. Rev. Lett.*, 100, 233004
Barlow, M. J., Swinyard, B. M., Owen, P. J., et al. 2013, *Science*, 342, 1343
Benz, A. O., Bruderer, S., van Dishoeck, E. F., et al. 2010, *A&A*, 521, L35
Brown, J. M., & Müller, H. S. P. 2009, *J. Mol. Spectrosc.*, 255, 68
Brown, P. R., Davies, P. B., & Johnson, S. A. 1986, *Chem. Phys. Lett.*, 132, 582
Brünken, S., Kluge, L., Stoffels, A., Asvany, O., & Schlemmer, S. 2014, *ApJ*, 783, L4
Buffa, G., Dore, L., Tinti, F., & Meuwly, M. 2006, *Chem. Phys. Chem.*, 7, 176
Cazzoli, G., Cludi, L., Buffa, G., & Pizzarini, C. 2012, *ApJS*, 203, 11
Cernicharo, J. 2012, in *Proc. of the European Conference on Laboratory Astrophysics*, eds. C. Stehleé, C. Joblin, & L. d'Hendecourt, *Eur. Astron. Soc. Publ. Ser.*, 4
Civiš, S., Blom, C. E., & Jensen, P. 1989, *J. Mol. Spectrosc.*, 138, 69
Cuadrado, S., Goicoechea, J. R., Pilleri, P. et al. 2014, *A&A*, submitted
Etzaluze, M., Goicoechea, J. R., Cernicharo, J., et al. 2013, *A&A*, 556, A137
Fuente, A., Rodríguez-Franco, A., García-Burillo, S., Martín-Pintado, J., & Black, J. H. 2003, *A&A*, 406, 899
Godard, B., Falgarone, E., Gerin, M., et al. 2012, *A&A*, 540, A87
Goicoechea, J. R., Joblin, C., Contursi, A., et al. 2011, *A&A*, 530, L16
Hirao, T., Yu, S., & Amano, T. 2008, *J. Mol. Spectrosc.*, 248, 26
Hovde, D. C., & Saykally, R. J. 1987, *J. Chem. Phys.*, 87, 4332
Laurini, S., Rolfs, R., Thorwirth, S., et al. 2006, *A&A*, 454, L47
Lis, D. C., & Schilke, P. 2003, *ApJ*, 597, L145
Menten, K. M., Wyrowski, F., Belloche, A., et al. 2011, *A&A*, 525, A77
Müller, H. S. P., Thorwirth, S., Roth, D. A., & Winnewisser, G. 2001, *A&A*, 370, L49
Müller, H. S. P., Schlöder, F., Stutzki, J., & Winnewisser, G. 2005, *J. Mol. Struct.*, 742, 215
Nagy, Z., van der Tak, F. F. S., Ossenkopf, V., et al. 2013, *A&A*, 550, A96
Neufeld, D. A., Falgarone, E., Gerin, M., et al. 2012, *A&A*, 542, L6
Pardo, J. R., Cernicharo, J., & Serabyn, E. 2001, *IEEE Trans. Antennas Propag.*, 49, 1683
Pickett, H. M. 1991, *J. Mol. Spectrosc.*, 148, 371
Pickett, H. M., Poynter, R. L., Cohen, E. A., et al. 1998, *JQSRT*, 60, 883
Savage, C., Apponi, A. J., & Ziurys, L. M. 2004, *ApJ*, 608, L73
Schilke, P., Neufeld, D. A., Müller, H. S. P., et al. 2014, *A&A*, 566, A29
Stäuber, P., Benz, A. O., Jørgensen, J. K., et al. 2007, *A&A*, 466, 977
Stoerzer, H., Stutzki, J., & Sternberg, A. 1995, *A&A*, 296, L9
Tinti, F., Bizzocchi, L., Degli Esposti, C., & Dore, L. 2007, *ApJ*, 669, L113
Zanchet, A., Agúndez, M., Herrero, V. J., Aguado, A., & Roncero, O. 2013, *AJ*, 146, 125

³ See <http://www.astro.uni-koeln.de/cdms/catalog>

H. S. P. Müller et al.: Re-determination of SH⁺ spectroscopic parameters**Appendix A: Complementary tables****Table A.1.** Gaussian fits to the $F = 0.5-1.5$ and $0.5-0.5$ lines of the $N_J = 1_0-0_1$ FS component of SH⁺ observed with three different telescopes toward the Orion Bar (for $v_{\text{LSR}}=10.50 \text{ km s}^{-1}$).

Telescope	Line	Rest frequency (MHz)	$\int T_{\text{mb}} dv$ (mK km s ⁻¹)	Line width (km s ⁻¹)	Signal-to-noise
IRAM 30 m	1.5–0.5	345 944.22 (20)	383 (30)	1.95 (19)	~10
	0.5–0.5	345 858.38 (20)	185 (31)	1.68 (32)	~5
ACA	1.5–0.5	345 944.55 (20)	260 (20)	1.23 (10)	~12
	0.5–0.5	345 858.42 (20)	114 (25)	1.10 (26)	~6
ALMA	1.5–0.5	345 944.29 (20)	668 (51)	1.20 (10)	~12
	0.5–0.5	345 858.00 (20)	295 (58)	0.92 (20)	~7

Notes. Parentheses show the Gaussian fit uncertainties (in units of the least significant digits). For the fitted frequencies, we adopt an overall 1σ uncertainty of 0.2 MHz ($\sim 0.2 \text{ km s}^{-1}$). This should be considered as a systematic uncertainty due to uncertainties in v_{LSR} (see text). IRAM 30 m spectrum smoothed to $\sim 0.4 \text{ km s}^{-1}$, similar to ALMA and ACA; signal-to-noise determined on the peaks and referring to $\sim 0.4 \text{ km s}^{-1}$ resolution for IRAM 30 m and to the native spectral resolution for ALMA and ACA.

Table A.2. Quantum numbers, frequencies (MHz), uncertainties unc. (MHz), Einstein A values (10^{-4} s^{-1}), upper g_{up} and lower g_{lo} state degeneracies, and upper E_{up} and lower E_{lo} state energies (cm^{-1}) of sulfanylium, SH⁺, below 1 THz.

$N' - N''$	$J' - J''$	$F' - F''$	Frequency	unc.	A	g_{up}	g_{lo}	E_{up}	E_{lo}
1–0	0–1	0.5–0.5	345 858.1957	0.1494	1.15	2	2	11.5395	0.0029
1–0	0–1	0.5–1.5	345 944.4205	0.1496	2.30	2	4	11.5395	0.0000
1–0	2–1	1.5–0.5	526 038.7348	0.0699	8.00	4	2	17.5496	0.0029
1–0	2–1	2.5–1.5	526 047.9440	0.0714	9.59	6	4	17.5471	0.0000
1–0	2–1	1.5–1.5	526 124.9597	0.0723	1.60	4	4	17.5496	0.0000
1–0	1–1	1.5–0.5	683 334.0618	0.5139	2.90	4	2	22.7964	0.0029
1–0	1–1	0.5–0.5	683 359.9250	0.4790	11.59	2	2	22.7973	0.0029
1–0	1–1	1.5–1.5	683 420.2867	0.4972	14.48	4	4	22.7964	0.0000
1–0	1–1	0.5–1.5	683 446.1499	0.4942	5.79	2	4	22.7973	0.0000
2–1	1–1	0.5–0.5	893 065.8800	0.9514	19.77	2	2	52.5868	22.7973
2–1	1–1	0.5–1.5	893 091.7433	0.9763	9.89	2	4	52.5868	22.7964
2–1	1–1	1.5–0.5	893 126.2353	1.0505	4.94	4	2	52.5888	22.7973
2–1	1–1	1.5–1.5	893 152.0985	0.9475	24.73	4	4	52.5888	22.7964

10.4. Goicoechea, Cuadrado et al. 2017 (A&A)

En este artículo se presentan las primeras imágenes en alta resolución angular ($4.9'' \times 3.0''$) de la emisión a 0.8 mm de los iones reactivos SH^+ , HOC^+ y SO^+ en el medio interestelar utilizando el interferómetro ACA–ALMA, así como otros cartografiados de moléculas de interés (CO , HCO^+ , H^{13}CO^+ y SO). Las observaciones se realizaron en la región de fotodisociación de la Barra de Orión. Se han analizado también los datos del barrido espectral realizado con IRAM-30m entre 80 – 360 GHz (ver Capítulo 5) de las especies mencionadas, con el objetivo de comprender su excitación y determinar sus abundancias en el frente de disociación de la Barra.

El análisis y los resultados obtenidos de las **observaciones realizadas con IRAM-30m** de las líneas de SH^+ , HOC^+ , SO^+ , HCO^+ , H^{13}CO^+ y SO se resumen a continuación:

■ Se han ajustado todas las líneas con perfiles Gaussianos usando el software CLASS obteniendo sus intensidades integradas de línea, anchuras, velocidades LSR y temperaturas de antena (ver Sección 10.6). Las líneas son estrechas ($\Delta v \simeq 1.5 - 3 \text{ km s}^{-1}$) y tienen una velocidad LSR entre $v_{\text{LSR}} = 10.3 - 10.7 \text{ km s}^{-1}$, que se corresponde con la velocidad de la Barra.

■ A partir de las líneas rotacionales de H^{13}CO^+ , HOC^+ , SO^+ y SO detectadas en el barrido espectral, se han determinado las temperaturas de rotación (T_{rot}) y las densidades de columna (N) con la construcción de diagramas rotacionales (ver Capítulo 4.1). Los diagramas de rotación se han calculado para dos casos límite: (i) suponiendo que la emisión es extensa (llenado uniforme del haz del telescopio) con $\eta_{\text{bf}} = 1$, y (ii) suponiendo que la emisión (corregida de la dilución del haz del telescopio) se produce en un filamento de $\sim 10''$ de anchura. Las especies observadas tienen temperaturas de rotación bajas ($T_{\text{rot}} \approx 10 - 30 \text{ K} \ll T_{\text{k}}$), y densidades de columna entre 10^{11} cm^{-2} (asumiendo llenado uniforme del haz del telescopio) y 10^{14} cm^{-2} (asumiendo emisión en filamento). En la Fig. 10.2 se muestran los resultados del análisis de los diagramas de rotación de todos los iones reactivos detectados en la Barra de Orión.

■ Para confirmar la correcta identificación de las líneas y comprobar que no existen solapamientos, se ha modelado el espectro de los iones reactivos SH^+ , HOC^+ y SO^+ usando el código de transferencia radiativa MADEx asumiendo una distribución de Boltzmann y una temperatura de excitación para la población de niveles rotacionales (ver Sección 10.5).

■ Se han estimado las condiciones físicas (promediadas dentro del haz del telescopio) que producen la emisión observada de H^{13}CO^+ , HOC^+ , SO^+ y SO a partir de modelos de excitación Montecarlo, que incluye colisiones inelásticas con H_2 y e^- , así como la excitación radiativa por el campo de radiación FIR del polvo en la región. Esto ha permitido refinar los cálculos de la densidad de columna de estas especies suponiendo que la emisión se produce en un filamento de $10''$ de ancho. Las intensidades de línea observadas de H^{13}CO^+ , HOC^+ y SO^+ se reproducen con $n(\text{H}_2) \simeq 10^5 \text{ cm}^{-3}$, $n(\text{e}^-) = 10 \text{ cm}^{-3}$ y $T_{\text{k}} \gtrsim 200 \text{ K}$. Sin embargo, el ajuste de las líneas de SH^+ requiere un gas más denso, $n(\text{H}_2) \simeq 10^6 \text{ cm}^{-3}$.

El análisis y los resultados obtenidos de las **observaciones realizadas con el interferómetro ALMA–ACA** se resumen a continuación:

■ Se presentan imágenes en alta resolución angular ($4.9'' \times 3.0''$) de la emisión a 0.8 mm de los iones reactivos SH^+ ($N, J, F = 1, 0, 1/2 \rightarrow 0, 1, 3/2$), HOC^+ ($J = 4 \rightarrow 3$) y SO^+ ($J^P = 15/2^- \rightarrow 13/2^+$) en la Barra de Orión. También se presentan mapas de la emisión integrada de línea de las especies $\text{CO } J = 3 \rightarrow 2$, $\text{HCO}^+ J = 4 \rightarrow 3$, $\text{H}^{13}\text{CO}^+ J = 4 \rightarrow 3$ y $\text{SO } N_J = 8_9 \rightarrow 7_8$) en la misma región. Estas observaciones se han complementado con observaciones ya existentes de $\text{H}_2^* v = 1 \rightarrow 0 \text{ S}(1)$ que traza el frente de disociación (Walmsley et al. 2000), la emisión a $8 \mu\text{m}$ observada por Spitzer/IRAC que traza la emisión de PAHs (Megeath et al. 2012), la emisión fluorescente de la línea OI a $1.32 \mu\text{m}$ que traza el frente de ionización de la PDR (Walmsley et al. 2000) y la emisión de $\text{CH}^+ J = 3 \rightarrow 2$ a $119.8 \mu\text{m}$ ($\sim 9''$ de resolución) y OH a $84.6 \mu\text{m}$ ($\sim 6''$ de resolución) observada por Herschel/PACS (Parikka et al. 2017).

De estas imágenes se pueden extraer los siguientes resultados:

1. El máximo de emisión de la línea ópticamente espesa CO $J = 3 \rightarrow 2$ proporciona un buen límite inferior a la temperatura del gas en la PDR ($\delta x > 15''$), con $T_k \gtrsim T_{\text{peak}}^{\text{CO}_{3 \rightarrow 2}} \simeq 150 \text{ K}$.
2. La emisión de los iones reactivos SH⁺ y HOC⁺ comienza muy cerca del frente de disociación y sigue la emisión extensa del H₂^{*} ($v = 2 \rightarrow 1$ y $1 \rightarrow 0$; Van der Werf et al. 1996). A pequeña escala ($\lesssim 3'' \approx 1000 \text{ AU}$), varios máximos de emisión de estos iones coinciden con los máximos de emisión del H₂^{*} $v = 1 \rightarrow 0 \text{ S}(1)$ (por ejemplo, a $\delta y \simeq -18''$).
3. El SO⁺ alcanza su máximo de emisión en una posición ligeramente más profunda de la nube que el SH⁺ y HOC⁺.
4. El cociente de abundancias [HCO⁺]/[HOC⁺] se incrementa a medida que el flujo de fotones FUV disminuye al aumentar la profundidad de la PDR, hasta que la emisión de HOC⁺ $J = 4 \rightarrow 3$ desaparece en el interior de la nube.

■ Con el objetivo de investigar la estratificación química en función de la atenuación del flujo FUV a medida que aumenta la extinción visual de la PDR, se han realizado cortes promediados de la intensidad de línea integrada perpendiculares a la Barra. Los cortes demuestran que la emisión de SH⁺ ($N, J, F = 1, 0, 1/2 \rightarrow 0, 1, 3/2$) y HOC⁺ ($J = 4 \rightarrow 3$) está restringida a una capa estrecha de $10''$ de ancho similar a un filamento ($\sim 0.02 \text{ pc}$), que sigue a la emisión del H₂^{*} delineando el frente de disociación. La línea de H¹³CO⁺ $J = 4 \rightarrow 3$ muestra un máximo de emisión cerca del frente de disociación, así como otro máximo a mayor profundidad dentro de la nube molecular (a $\delta x \approx 30''$, regiones más frías y protegidas de la radiación FUV), el cual coincide con el máximo de emisión del SO $N_J = 8_9 \rightarrow 7_8$. Las diferentes anchuras de línea obtenidas para estas especies en las observaciones de ACA respaldan estos resultados. En particular, la línea de SO $N_J = 8_9 \rightarrow 7_8$ es más estrecha ($\Delta v = 1.8 \pm 0.1 \text{ km s}^{-1}$) que las líneas de los iones reactivos SO⁺ $J^P = 15/2^- \rightarrow 13/2^+$ ($\Delta v = 2.1 \pm 0.1 \text{ km s}^{-1}$), HOC⁺ $J = 4 \rightarrow 3$ ($\Delta v = 2.7 \pm 0.1 \text{ km s}^{-1}$) y SH⁺

$N, J, F = 1, 0, 1/2 \rightarrow 0, 1, 3/2$ ($\Delta v = 2.8 \pm 0.1 \text{ km s}^{-1}$) las cuales surgen del gas más irradiado cerca del borde de la PDR.

■ Se han realizado modelos químicos en fase gas con el código de PDRs Meudon para investigar la formación y destrucción de los iones reactivos en la PDR y se han comparado las densidades de columna calculadas con las predichas por los modelos y con la distribución espacial observada. Se han obtenido los siguientes resultados:

1. La emisión de SH⁺ y HOC⁺ está restringida a una región estrecha entre $2'' - 10''$ de ancho (entre $\sim 800 - 4000 \text{ AU}$ dependiendo de la geometría asumida para la PDR) que sigue la emisión del H₂^{*}. Ambos iones se forman eficientemente muy cerca de la zona de transición H/H₂, a una profundidad de $A_V \lesssim 1 \text{ mag}$ en la nube neutra, donde coexisten altas abundancias de C⁺, S⁺ y H₂^{*}.
2. Las densidades de columna calculadas entre $A_V = 0 - 10 \text{ mag}$ de HOC⁺, H¹³CO⁺ y SO⁺ se encuentran dentro del rango estimado por los modelos de PDR.
3. Los modelos de PDR predicen que el principal máximo de emisión del SO⁺ está cerca del de SH⁺, próximo al frente de disociación, pero en los mapas de alta resolución angular de ACA–ALMA se observa que el máximo de emisión del SO⁺ se produce más hacia el interior de la nube que SH⁺ o HOC⁺. El SO⁺ se forma por reacción de S⁺ con OH, y su destrucción está dominada por la recombinación electrónica (con un tiempo de vida de $\tau_{e^-} = 139 \text{ h} [10^5 \text{ cm}^{-3}/n_H][10^{-4}/x_e]$ ^{II} y la fotodisociación ($\tau_{\text{fotodis.}} = 27.8 \text{ h } e^{1.7 A_V}$ con $\chi = 10^4$), y no por reacciones con H₂ o H, a diferencia de los otros iones reactivos. Por lo tanto, la abundancia de SO⁺ va a depender del cociente OH/ x_e (Turner 1996) y de la tasa de fotodisociación. El SO⁺ alcanza un máximo de emisión a mayor profundidad dentro de la nube que la línea de OH $^2\Pi_{3/2} J = 7/2^- \rightarrow 5/2^+$ a $84 \mu\text{m}$ lo que sugiere que cerca del frente de disociación la densidad electrónica es mayor que en el modelo, o bien que, más probablemente, la tasa de fotodisociación del SO⁺ sea mayor que la adoptada en los modelos PDR. De hecho, SO⁺ puede disociarse por ab-

^{II} Asumiendo $T_k = T_e = 300 \text{ K}$

sorción de fotones de baja energía (<5 eV, Bissantz et al. 1992). Este proceso no se tiene en cuenta en el modelo de PDR y puede ser la razón de la discrepancia entre las observaciones y los resultados de los modelos teóricos.

4. La densidad de columna observada para el SH^+ es un factor $\sim 3 - 30$ mayor que lo que predicen los modelos (dependiendo de la geometría adoptada). El SH^+ se forma mediante la reacción de S^+ con H_2^* . Esta reacción se vuelve exotérmica, aunque lenta, cuando $v \gtrsim 2$ (Zanchet et al. 2013). La diferencia entre las observaciones y los modelos teóricos podría significar que existe una fuente adicional de SH^+ que no está reflejada en los modelos: sobreabundancia de H_2 $v \gtrsim 2$ o picos de temperatura/presión debido a la dinámica de la PDR (Goicoechea et al 2016).

■ Por último, se ha llevado a cabo un estudio de la excitación de estas especies.

La anchura de las líneas de SH^+ y HOC^+ es mucho menor ($\sim 2 - 3 \text{ km s}^{-1}$) que las observadas por Nagy et al. (2013) y Parikka et al. (2017) para el CH^+ ($\sim 4.5 - 5.5 \text{ km s}^{-1}$) en la Barra. Se piensa que la gran anchura de las líneas de CH^+ en comparación con las otras especies es una consecuencia de su proceso de formación y de su excitación. El CH^+ se forma con una temperatura de formación efectiva de $\sim 5360 \text{ K}$ en la reacción de C^+ con H_2^* dentro de un gas que tiene una temperatura cinética de $\sim 200 - 500 \text{ K}$. Este exceso de energía se emplea en excitación y movimiento. Pero para este ion reactivo, las colisiones reactivas con H y H_2 , las cuales destruyen al CH^+ , son más rápidas ($\tau_{\text{H}} = 3.7 \text{ h} [10^5 \text{ cm}^{-3}/n_{\text{H}}][1 - f_{\text{H}_2}]$ y $\tau_{\text{H}_2} = 4.6 \text{ h} [10^5 \text{ cm}^{-3}/n_{\text{H}}] f_{\text{H}_2}^{-1}$)^{II} que los procesos colisionales elásticos (por el cual se termalizaría con el medio) e inelásticos (que producen la excitación de la molécula; $\tau_{0 \rightarrow 1}(\text{col.}) = 7.6 \text{ h}$ y $\tau_{3 \rightarrow 4}(\text{col.}) = 52.7 \text{ h}$)^{III}. En esta visión, se concluye que la anchura de las líneas del CH^+ está relacionada con el exceso de energía producido en su formación y no con la temperatura cinética del medio, ni con el aumento de la turbulencia en la región donde se ha formado. El tiempo de vida de SH^+ y HOC^+ , aunque también efímero, es mayor

que el de CH^+ ($\tau_{\text{SH}^+ + \text{H}} = 25 \text{ h} [10^5 \text{ cm}^{-3}/n_{\text{H}}][1 - f_{\text{H}_2}]$ y $\tau_{\text{HOC}^+ + \text{H}_2} = 14.6 \text{ h} [10^5 \text{ cm}^{-3}/n_{\text{H}}] f_{\text{H}_2}^{-1}$)^{II} y en su vida media, sí les da tiempo a colisionar inelásticamente con otras especies (e.g. $\tau_{0 \rightarrow 1}(\text{col.}) = 2.3 \text{ h}$, $\tau_{3 \rightarrow 4}(\text{col.}) = 3.5 \text{ h}$)^{II}. Como las colisiones sí influyen en su excitación (aunque no son dominantes ya que $T_{\text{rot}} \ll T_{\text{k}}$), las temperaturas de rotación calculadas para SH^+ , HOC^+ y SO^+ son mucho más bajas que la calculada para CH^+ ($T_{\text{rot}} \simeq 150 \text{ K}$; Nagy et al. 2013).

Cuanto más ligera es una molécula mayor es su constante de rotación, por lo que sus transiciones rotacionales aparecerán a mayor frecuencia (en el rango submilimétrico – FIR). Debido a esto, la emisión rotacional del CH^+ se produce en el rango submilimétrico/FIR, mientras que el HOC^+ , que es una molécula más pesada, emite principalmente en el rango milimétrico. Por lo tanto, las densidades críticas del CH^+ son muy altas ($n_{\text{cr}}(\text{CH}^+ 4 \rightarrow 3) \simeq 7 \times 10^9 \text{ H}_2 \text{ cm}^{-3}$) comparadas con las del HOC^+ ($n_{\text{cr}}(\text{HOC}^+ 4 \rightarrow 3) \simeq 4 \times 10^6 \text{ H}_2 \text{ cm}^{-3}$ a $T_{\text{k}} = 200 \text{ K}$). Estos valores son mucho más elevados que la densidad del gas en la Barra de Orión. Por tanto, sin un mecanismo de excitación distinto de las colisiones, cabría esperar que $T_{\text{rot}}(\text{CH}^+) \ll T_{\text{rot}}(\text{HOC}^+)$. Sin embargo, el CH^+ tiene un tiempo de vida mucho menor que los otros iones reactivos, y más corta que la escala de tiempo para que se excite a través de colisiones inelásticas con otras especies. Pero el hecho de que $T_{\text{rot}}(\text{CH}^+) \gg T_{\text{rot}}(\text{HOC}^+)$, debe estar relacionado con el proceso de formación del CH^+ y con procesos de excitación radiativos en esta molécula.

En una nube molecular, el polvo absorbe parte de la radiación UV calentándose y re-emitiendo principalmente en el FIR, pudiendo producir la excitación radiativa de las especies. También se produce la emisión del polvo en el rango milimétrico, pero la intensidad del continuo en este rango es mucho más baja. Como consecuencia, las transiciones rotacionales del CH^+ en el FIR tienen tasas de bombeo radiativas mayores que las transiciones (sub)milimétricas de los iones más pesados (en las condiciones físicas de la Barra y para los niveles de continuo FIR observados). La escala de tiempo para que se produzca una excitación radiativa por absorción de fotones del continuo del polvo en el CH^+ es de $\tau_{0 \rightarrow 1}(\text{rad.}) = 2.2 \text{ h}$ y $\tau_{3 \rightarrow 4}(\text{rad.}) = 0.1 \text{ h}$ ^{IV} (el continuo

^{III} Para $n(\text{H}_2) = 10^5 \text{ cm}^{-3}$ y $n(e^-) = 10 \text{ cm}^{-3}$

^{IV} Calculado con el modelo de emisión continua de la Barra de Orión (ver Goicoechea et al. 2017)

es más intenso a frecuencias más altas y por eso la tasa de bombeo radiativo de la transición $J = 3 \rightarrow 4$ es más rápida que la $J = 0 \rightarrow 1$). Entonces, durante su corta vida, el CH^+ no colisiona inelásticamente con otras moléculas pero sí se puede excitar radiativamente muchas veces. El tiempo de vida del CH^+ es mayor para el resto de iones reactivos, como en el caso del HOC^+ , y, para las condiciones de la Barra, el tiempo que tarda en colisionar inelásticamente con otras especies $\tau_{0 \rightarrow 1}(\text{col.}) = 2.3 \text{ h}$ y $\tau_{3 \rightarrow 4}(\text{col.}) = 3.5 \text{ h}$ es menor que su vida media ($\tau_{\text{H}_2} = 14.6 \text{ h}$), por lo que sí

colisiona con otras moléculas a lo largo de su vida. La excitación radiativa es más lenta que en el caso del CH^+ porque en el rango milimétrico la emisión del polvo es mucho menor ($\tau_{0 \rightarrow 1}(\text{rad.}) = 16.4 \text{ h}$ y $\tau_{3 \rightarrow 4}(\text{rad.}) = 16.9 \text{ h}$). Esta diferencia explica que los iones reactivos más pesados tengan líneas más estrechas (dispersión de velocidad más pequeña debido a colisiones elásticas), temperaturas rotacionales menores (mayor número de colisiones inelásticas) y distribuciones espaciales ligeramente diferentes al CH^+ .

A&A 601, L9 (2017)
 DOI: [10.1051/0004-6361/201730716](https://doi.org/10.1051/0004-6361/201730716)
 © ESO 2017

**Astronomy
&
Astrophysics**

LETTER TO THE EDITOR

Spatially resolved images of reactive ions in the Orion Bar^{★,★★}

Javier R. Goicoechea¹, Sara Cuadrado¹, Jérôme Pety^{2,3}, Emeric Bron^{1,3}, John H. Black⁴,
 José Cernicharo¹, Edwige Chapillon^{2,5}, Asunción Fuente⁶, and Maryvonne Gerin³

¹ Instituto de Ciencias de Materiales de Madrid (CSIC), 28049 Madrid, Spain
 e-mail: jr.goicoechea@icmm.csic.es

² Institut de Radioastronomie Millimétrique, 38406 Saint-Martin d'Hères, France

³ LERMA, Obs. de Paris, PSL Research University, CNRS, Sorbonne Universités, 75005, UPMC Univ. Paris 06, ENS, France

⁴ Chalmers University of Technology, Onsala Space Observatory, 43992 Onsala, Sweden

⁵ OASU/LAB-UMR5804, CNRS, Université Bordeaux, 33615 Pessac, France

⁶ Observatorio Astronómico Nacional (IGN). Apartado 112, 28803 Alcalá de Henares, Spain

Received 1 March 2017 / Accepted 21 April 2017

ABSTRACT

We report high angular resolution ($4.9'' \times 3.0''$) images of reactive ions SH^+ , HOC^+ , and SO^+ toward the Orion Bar photodissociation region (PDR). We used ALMA-ACA to map several rotational lines at 0.8 mm, complemented with multi-line observations obtained with the IRAM 30 m telescope. The SH^+ and HOC^+ emission is restricted to a narrow layer of $2''$ - to $10''$ -width (≈ 800 to 4000 AU depending on the assumed PDR geometry) that follows the vibrationally excited H_2 emission. Both ions efficiently form very close to the H/H_2 transition zone, at a depth of $A_V \lesssim 1$ mag into the neutral cloud, where abundant C^+ , S^+ , and H_2^+ coexist. SO^+ peaks slightly deeper into the cloud. The observed ions have low rotational temperatures ($T_{\text{rot}} \approx 10\text{--}30$ K $\ll T_k$) and narrow line-widths ($\sim 2\text{--}3$ km s⁻¹), a factor of ≈ 2 narrower than those of the lighter reactive ion CH^+ . This is consistent with the higher reactivity and faster radiative pumping rates of CH^+ compared to the heavier ions, which are driven relatively more quickly toward smaller velocity dispersion by elastic collisions and toward lower T_{rot} by inelastic collisions. We estimate column densities and average physical conditions from an excitation model ($n(\text{H}_2) \approx 10^5\text{--}10^6$ cm⁻³, $n(e^-) \approx 10$ cm⁻³, and $T_k \approx 200$ K). Regardless of the excitation details, SH^+ and HOC^+ clearly trace the most exposed layers of the UV-irradiated molecular cloud surface, whereas SO^+ arises from slightly more shielded layers.

Key words. astrochemistry – line: identification – ISM: clouds – (ISM:) photon-dominated region (PDR)

1. Introduction

Reactive ions are transient species for which the timescale of reactive collisions with H_2 , H , or e^- (leading to a chemical reaction, and thus molecule destruction) is comparable to, or shorter than, that of inelastic collisions (Black 1998; Nagy et al. 2013; Godard & Cernicharo 2013). The formation of reactive ions such as CH^+ and SH^+ depends on the availability of C^+ and S^+ (i.e., of UV photons and thus high ionization fractions $x_e = n(e^-)/n_{\text{H}}$), and on the presence of excited H_2 (either UV-pumped or hot and thermally excited). This allows overcoming the high endothermicity (and sometimes energy barrier) of some of the key initiating chemical reactions (e.g., Gerin et al. 2016). The reaction $\text{C}^+ + \text{H}_2(v) \rightarrow \text{CH}^+ + \text{H}$, for example, is endothermic by $\Delta E/k \approx 4300$ K if $v = 0$, but exothermic and fast for $v \geq 1$ (Hierl et al. 1997; Agúndez et al. 2010). Despite their short lifetimes, reactive ions can be detected and used to probe energetic processes in irradiated, circumstellar (e.g.,

Cernicharo et al. 1997), interstellar (e.g., Fuente et al. 2003), or protostellar (e.g., Benz et al. 2016) gas.

CO^+ and HOC^+ (the metastable isomer of HCO^+) have been detected in low angular resolution observations of UV-irradiated clouds near massive stars (Stoerzer et al. 1995; Apponi et al. 1999; Fuente et al. 2003). They are predicted to form close to the H/H_2 transition zone, the dissociation front (DF), by high-temperature reactions of C^+ with OH and H_2O , respectively (e.g., Sternberg & Dalgarno 1995). HOC^+ also forms by the reaction $\text{CO}^+ + \text{H}_2 \rightarrow \text{HOC}^+ + \text{H}$; thus, CO^+ and HOC^+ abundances are likely related (Smith et al. 2002). In photodissociation regions (PDRs), SO^+ is predicted to form primarily via the reaction $\text{S}^+ + \text{OH} \rightarrow \text{SO}^+ + \text{H}$ (e.g., Turner 1996). These ion-neutral reactions leading to CO^+ , HOC^+ and SO^+ are highly exothermic.

Herschel allowed the detection of OH , CH^+ , and SH^+ emission toward dense PDRs (Goicoechea et al. 2011; Nagy et al. 2013, 2017; Parikka et al. 2017). Unfortunately, the limited size of the space telescope did not permit us to resolve the $\Delta A_V \lesssim 1$ mag extent of the DF (a few arcsec for the closest PDRs). Therefore, the true spatial distribution of the reactive ions emission is mostly unknown. Unlike CH^+ , rotational lines of SH^+ can be observed from the ground (Müller et al. 2014). Here we report the first interferometric images of SH^+ , HOC^+ , and SO^+ .

The Orion Bar is a dense PDR (Hollenbach & Tielens 1999) illuminated by a far-UV (FUV) ($6\text{ eV} < E < 13.6\text{ eV}$) field of a

* This paper makes use of the following ALMA data: ADS/JAO.ALMA#2012.1.00352.S. ALMA is a partnership of ESO (representing its member states), NSF (USA), and NINS (Japan), together with NRC (Canada), and NSC and ASIAA (Taiwan), in cooperation with the Republic of Chile. The Joint ALMA Observatory is operated by ESO, AUI/NRAO, and NAOJ.

** Includes IRAM 30 m telescope observations. IRAM is supported by INSU/CNRS (France), MPG (Germany), and IGN (Spain).

A&A 601, L9 (2017)

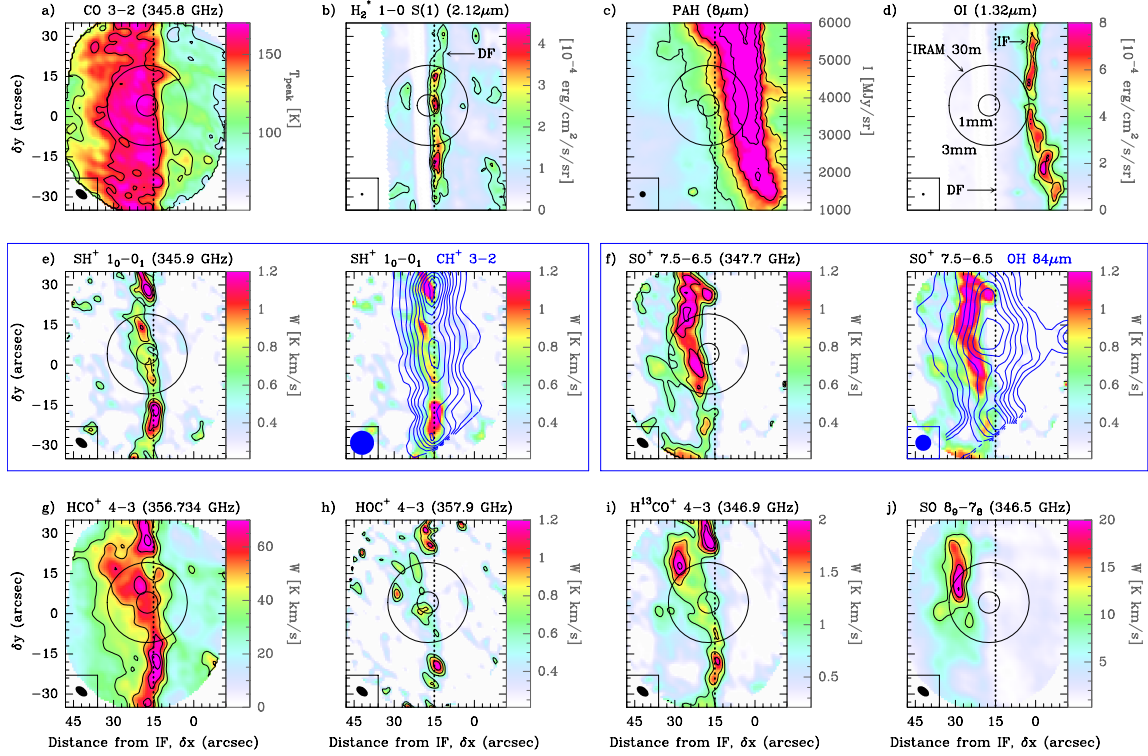


Fig. 1. ALMA-ACA and complementary images of the Bar. All images have been rotated to bring the FUV illuminating direction roughly in the horizontal direction (*from the right*). The circles indicate the position of our IRAM 30 m line survey, with beams of $\approx 8''$ ($\approx 30''$) at 1 mm (3 mm). The upper row shows images of **b)** the $\text{H}_2 v = 1-0 S(1)$ line at $2.12 \mu\text{m}$, delineating the DF (Walmsley et al. 2000); **c)** the *Spitzer* $8 \mu\text{m}$ emission produced mainly by PAHs (Megeath et al. 2012), and **d)** the fluorescent O I line at $1.32 \mu\text{m}$ at the H II/PDR boundary (Walmsley et al. 2000). The blue contours in **e)** and **f)** represent the CH^+ $119.8 \mu\text{m}$ ($\approx 9''$ resolution) and OH $84.6 \mu\text{m}$ ($\approx 6''$) lines mapped by *Herschel* (Parikka et al. 2017).

few 10^4 times the mean interstellar radiation field. Because of its proximity (~ 414 pc, Menten et al. 2007) and nearly edge-on orientation, the Bar is a template to investigate the dynamics and chemistry in strongly FUV-irradiated gas (e.g., Pellegrini et al. 2009; Cuadrado et al. 2015; Goicoechea et al. 2016).

2. Observations and data reduction

The interferometric images were taken with the 7 m antennas of the Atacama Compact Array (ACA), Chile. The observations consisted of a 10-pointing mosaic centered at $\alpha(2000) = 5^{\text{h}}35^{\text{m}}20.6^{\text{s}}$; $\delta(2000) = -05^{\circ}25'20''$. The total field-of-view (FoV) is $\sim 50'' \times 50''$. Target line frequencies lie in the ~ 345 – 358 GHz range (Table A.1). Lines were observed with correlators providing ~ 500 kHz resolution over a 937.5 MHz bandwidth. The ALMA-ACA observation time was ~ 6 h. In order to recover the extended emission filtered out by the interferometer, we used fully sampled single-dish maps as zero- and short-spacings. The required high-sensitivity maps were obtained using the ALMA total-power 12 m antennas ($\sim 19''$ resolution). We used the GILDAS/MAPPING software to create the short-spacing visibilities not sampled by ALMA-ACA. These visibilities were merged with the interferometric observations (Pety & Rodríguez-Fernández 2010). The dirty image was deconvolved using the Högbom CLEAN algorithm. The resulting cubes were scaled from Jy/beam to brightness temperature scale using the synthesized beam size of $4.9'' \times 3.0''$. The achieved rms noise is ~ 10 – 20 mK per 0.5 km s^{-1} smoothed channel, with an

absolute flux accuracy of $\sim 10\%$. The resulting images are shown in Fig. 1.

In addition, we carried out pointed observations toward the DF with the IRAM 30 m telescope (Spain). The observed position lies roughly at the center of the ALMA-ACA field (see circles in Fig. 1). This position is at $\Delta\text{RA} = +3''$ and $\Delta\text{Dec} = -3''$ from the “ CO^+ peak” of Stoez et al. (1995). These multi-line observations are part of a complete 80–360 GHz line survey at resolutions between $\sim 30''$ and $\sim 7''$ (Cuadrado et al. 2015).

3. Results: morphology and emission properties

In addition to the submillimeter (submm) emission images obtained with ALMA-ACA, panels b, c, and d in Fig. 1 show images of the DF traced by the vibrationally excited molecular hydrogen ($\text{H}_2 v = 1-0 S(1)$ line (Walmsley et al. 2000), of the atomic PDR (hydrogen is predominantly in neutral atomic form) as traced by the *Spitzer*/IRAC $8 \mu\text{m}$ emission (Megeath et al. 2012), and of the ionization front (IF), the H/H $^+$ transition zone. The δx axis shows the distance in arcsec to the IF. Thus, in each panel, the FUV-photon flux decreases from right to left.

The peak of the optically thick CO 3–2 line provides a good lower limit to the gas temperature in the molecular PDR ($\delta x > 15''$), with $T_{\text{K}} \gtrsim T_{\text{peak}}^{\text{CO}3-2} \approx 150$ K (Fig. 1a). The ALMA-ACA images show that, except for SO^+ , the emission from reactive ions starts very close to the DF, and globally follows that of H_2 . On small scales ($\lesssim 3'' \approx 1000$ AU), several emission peaks of these ions coincide with the brightest $\text{H}_2 v = 1-0 S(1)$ peaks (e.g., at $\delta y \approx -18''$). Although the SH^+ and HOC^+ peaks at

J. R. Goicoechea et al.: Spatially resolved images of reactive ions in the Orion Bar

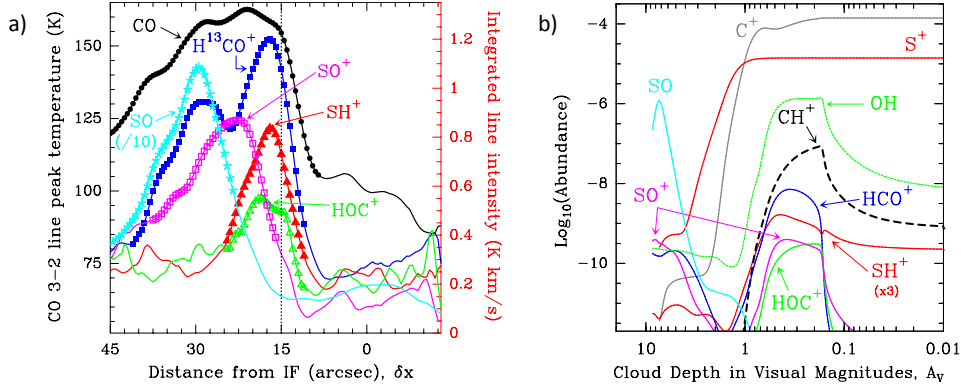


Fig. 2. a) ALMA-ACA averaged intensity cuts perpendicular to the Orion Bar. Except for CO $J = 3-2$ line (peak temperature in K), cuts show integrated line intensities (in K km s⁻¹). Symbols do not have any meaning, they are used to improve figure readability. b) Isobaric model of a PDR with $P_{\text{th}}/k = 2 \times 10^8$ K cm⁻³ and $\chi = 10^4$. In both figures, the FUV radiation from the Trapezium cluster comes from the right-hand side.

$\delta y \approx +27''$ do not exactly match a $\text{H}_2 v = 1-0$ peak, observations do show the presence of extended $\text{H}_2 v = 2-1$ and $1-0$ emission along the SH^+ and HOC^+ -emitting zone (van der Werf et al. 1996). In fact, H_2^* emission from very high vibrational levels (up to $v = 10$ or $E/k \approx 50\,000$ K) has recently been reported (Kaplan et al. 2017).

To investigate the molecular emission stratification, in Fig. 2a we show averaged emission cuts perpendicular to the Bar. The cuts demonstrate that the $\text{SH}^+ 1_0-0_1$ and $\text{HOC}^+ 4-3$ lines arise from a narrow emission layer (akin to a filament), with a half-power-width of $\Delta(\delta x) \approx 10''$ (≈ 0.02 pc), that delineates the DF. The $\text{H}^{13}\text{CO}^+ 4-3$ line displays this emission peak close to the DF, as well as another peak deeper inside the molecular cloud (at $\delta x \approx 30''$) that is dominated by emission from the colder molecular cloud interior. The $\text{SO } 8_9-7_8$ line arises from these more FUV-shielded zones. These spatial emission trends are supported by the different line-widths (averaged over the ACA field of view, see Table A.1). In particular, the $\text{SO } 8_9-7_8$ line is narrower ($\Delta v = 1.8 \pm 0.1$ km s⁻¹) than the $\text{SO}^+ 15/2^--13/2^+$ ($\Delta v = 2.1 \pm 0.1$ km s⁻¹), $\text{HOC}^+ 4-3$ ($\Delta v = 2.7 \pm 0.1$ km s⁻¹), and $\text{SH}^+ 1_0-0_1$ ($\Delta v = 2.8 \pm 0.1$ km s⁻¹) lines that arise from the more FUV-irradiated gas near the molecular cloud edge.

We first derived H^{13}CO^+ , HOC^+ , SO^+ , and SO rotational temperatures (T_{rot}) and column densities (N) by building rotational population diagrams from our IRAM 30 m observations (line survey position, Cuadrado et al. 2015). Results are shown in Tables 1 and B.1. H^{13}CO^+ and HOC^+ have high dipole moments (and SO^+ to a lesser extent, but see Appendix D). Hence, the observed submm lines have moderate critical densities (several 10^6 H₂ cm⁻³). The low- J transitions toward the line survey position are subthermal ($T_{\text{rot}} \approx 15$ K $\ll T_k$). Their column densities are relatively small: from $\sim 10^{11}$ cm⁻² (assuming uniform beam filling), to $\sim 10^{12}$ cm⁻² (for a more realistic filamentary emission layer of $\sim 10''$ width and correcting for beam dilution).

In addition, we estimated the average physical conditions that lead to the H^{13}CO^+ , HOC^+ , SO^+ and SH^+ emission toward the line survey position. We used a Monte Carlo model (Appendix D) that includes inelastic collisions with H_2 and e^- , as well as radiative excitation by the far-IR dust radiation field in the region (see Arab et al. 2012, and Fig. D.1). This allowed us to refine the source-averaged column density estimation for a $10''$ -wide emission layer (Table 1). The observed H^{13}CO^+ , HOC^+ , and SO^+ line intensities and T_{rot} are reproduced with $n(\text{H}_2) \approx 10^5$ cm⁻³, $n(\text{e}^-) = 10$ cm⁻³, and $T_k \gtrsim 200$ K

(thus consistent with $T_{\text{peak}}^{\text{CO } 3-2}$). However, with the set of assumed SH^+ collisional rates, fitting the SH^+ lines requires denser gas, $\sim 10^6$ cm⁻³ (see also Nagy et al. 2013). As T_k is expected to sharply vary along the DF (e.g., Sternberg & Dalgarno 1995), the result of these single-component models should be taken as average conditions (over the ACA resolution). We note that at the distance to Orion, $4''$ is equivalent to 1 mag of visual extinction for $n_{\text{H}} = 10^5$ cm⁻³.

Low $[\text{HCO}^+]/[\text{HOC}^+]$ abundance ratios (~ 200 – 400) have previously been inferred from lower angular resolution ($10''$ to $70''$, depending on the line and telescope) pointed observations toward the Bar (Apponi et al. 1999; Fuente et al. 2003). Such ratios are much lower than those predicted in FUV-shielded gas (>1000 , e.g., Goicoechea et al. 2009). Given the similar A_{ul} coefficient and upper level energy (E_{u}/k) of the H^{13}CO^+ and $\text{HOC}^+ 4-3$ transitions, their integrated intensity ratio is a good measure of the $[\text{HCO}^+]/[\text{HOC}^+]$ isomeric ratio (lines are optically thin). The observed $\text{H}^{13}\text{CO}^+/\text{HOC}^+ 4-3$ line ratio is equivalent to a roughly constant $[\text{HCO}^+]/[\text{HOC}^+]$ ratio of 145 ± 5 along the $\delta x = 12$ – $22''$ layer (assuming $[\text{HCO}^+]/[\text{H}^{13}\text{CO}^+] = 67$). The ratio then increases as the FUV-photon flux decreases, $[\text{HCO}^+]/[\text{HOC}^+] = 180 \pm 4$ along the $\delta x = 22$ – $32''$ layer, until the $\text{HOC}^+ 4-3$ signal vanishes deeper inside the molecular cloud.

4. Discussion

ALMA $\text{HCO}^+ 4-3$ images at $\sim 1''$ resolution suggest the presence of high-pressure structures, $P_{\text{th}}/k = n_{\text{H}} T_k \approx (1-2) \times 10^8$ K cm⁻³, close to the DF (Goicoechea et al. 2016). Despite the different resolutions, several of these HCO^+ peaks coincide with the brightest $\text{SH}^+ 1_0-0_1$ and $\text{OH } 84\mu\text{m}$ peaks (Figs. 1e and f). Thus, it is reasonable to assume that SH^+ arises from these structures.

We used version 1.5.2 of the Meudon PDR code (Le Petit et al. 2006) to model the formation and destruction of reactive ions in a constant thermal-pressure slab of FUV-irradiated gas (P_{th}/k from 2×10^7 to 2×10^8 K cm⁻³). Figure 2b shows abundance profiles (with respect to H nuclei) predicted by the high-pressure model. The FUV-photon flux is $\chi = 10^4$ (in Draine units), the expected radiation field close to the DF. Compared to Nagy et al. (2013), we have included more recent rates for reactions of S^+ with $\text{H}_2(v)$ (Zanchet et al. 2013). We adopt an undepleted sulfur abundance of $[\text{S}] = 1.4 \times 10^{-5}$ (Asplund et al. 2005). The predicted abundance stratification in

A&A 601, L9 (2017)

Table 1. Inferred column densities and PDR model predictions.

	$\log_{10} N [\text{cm}^{-2}]$		
	Rotational diagram	Non-LTE [†]	PDR Model [‡]
H ¹³ CO ⁺	11.8 ^a –12.1 ^b	12.3	11.0 ^c –12.2 ^d
HOC ⁺	11.6 ^a –11.9 ^b	12.0	11.7 ^c –12.9 ^d
SO ⁺	12.3 ^a –12.5 ^b	12.5	12.4 ^c –13.5 ^d
SH ⁺	–	13.2	11.7 ^c –12.8 ^d

Notes. ^(†) From a non-LTE model. ^(‡) Isobaric PDR model ($P_{\text{th}}/k = 2 \times 10^8 \text{ K cm}^{-3}$ and $\chi = 10^4$). Columns integrated up to $A_V = 10$. ^(a) Assuming uniform beam filling. ^(b) For a filament of 10''-width. ^(c) Face-on geometry. ^(d) Edge-on geometry with a tilt angle of $\alpha \simeq 4^\circ$.

Fig. 2b qualitatively agrees with the observational intensity cut in Fig. 2a (but recall that the spatial scales are not directly comparable, as for the studied range of P_{th}/k in these 1D isobaric models, 10 mag of visual extinction corresponds to 1–10''). To be more specific, we compared the inferred column densities with those predicted by the PDR model (Table 1). Because the Orion Bar is not a perfect edge-on PDR, this comparison requires a knowledge of the tilt angle (α) with respect to a pure edge-on geometry, and of the line-of-sight cloud-depth (l_{depth}). Recent studies constrain α and l_{depth} to $\lesssim 4^\circ$ and $\approx 0.28 \text{ pc}$, respectively (Salgado et al. 2016; Andree-Labsch et al. 2017). For this geometry, the intrinsic width of the SH⁺- and HOC⁺-emitting layer would be narrower, from $\approx 10''$ (the observed value) to $\approx 2''$ (if the Bar is actually tilted). Given these uncertainties, the agreement between the range of observed and predicted columns is satisfactory for HOC⁺, H¹³CO⁺, and SO⁺ (Table 1). Although PDR models with lower pressures predict qualitatively similar stratification, and a reactive ion abundance peak also at $A_V \lesssim 1 \text{ mag}$ (where C⁺, S⁺, and H₂⁺ coexist), a model with ten times lower P_{th} underestimates $N(\text{HOC}^+)$ and $N(\text{SO}^+)$ by large factors ($\gtrsim 20$). This is related to the lower predicted OH column densities (by a factor of ~ 25), key in the formation of CO⁺, HOC⁺ and SO⁺ (Goicoechea et al. 2011). Interestingly, SO⁺ peaks deeper inside the cloud, while in the PDR models the main SO⁺ peak is close to that of SH⁺. Compared to the other ions, SO⁺ destruction near the DF is dominated by recombination and photodissociation (not by reactions with H₂ or H). Hence, $[\text{SO}^+]$ depends on the $[\text{OH}]/x_e$ ratio (Turner 1996) and on the photodissociation rate. The SO⁺ line peaks deeper inside the cloud than the OH $^2\Pi_{3/2} J = 7/2^- - 5/2^+$ line (Fig. 1f) suggesting that near the DF either $n(e^-)$ is higher than in the model or, more likely, that the SO⁺ photodissociation rate is larger. Indeed, SO⁺ can be dissociated by lower E photons ($< 5 \text{ eV}$, Bissantz et al. 1992). This process is not taken into account in the PDR model.

For SH⁺, we infer a column density that is a factor ≈ 3 –30 above the PDR model prediction (depending on α). Recall that reaction $\text{S}^+ + \text{H}_2(v) \rightarrow \text{SH}^+ + \text{H}$ (endothermic by $\Delta E/k \approx 9860 \text{ K}$ when $v = 0$) only becomes exothermic when $v \geq 2$, but remains slow even then (Zanchet et al. 2013). The mismatch between model and observation, if relevant, may suggest an additional source of SH⁺ that is not well captured by the model: overabundant H₂($v \geq 2$) or temperature/pressure spikes due to the PDR dynamics (Goicoechea et al. 2016).

Regardless of the excitation details, our observations show that detecting SH⁺ and HOC⁺ emission is an unambiguous indication of FUV-irradiated gas. Intriguingly, SH⁺ and HOC⁺ line-widths are narrower than those of CH⁺ ($\Delta v \approx 4.5$ –5.5 km s^{−1}, Nagy et al. 2013; Parikka et al. 2017). The broader CH⁺ lines in

the Bar have been interpreted as a signature of CH⁺ high reactivity (Nagy et al. 2013). In this view, the exothermicity (equivalent to an effective formation temperature of about 5360 K) of the dominant formation route, reaction $\text{C}^+ + \text{H}_2(v \geq 1) \rightarrow \text{CH}^+ + \text{H}$, goes into CH⁺ excitation and motion. However, reactive collisions of CH⁺ with H and H₂ are faster than elastic and rotationally inelastic collisions (see Appendices C and D). In particular, the CH⁺ lifetime is so short (a few hours) that the molecule does not have time to thermalize, by elastic collisions, its translational motions to a velocity distribution at T_k (Black 1998). Hence, the broad lines would be related to the energy excess upon CH⁺ formation (thousands of K) and not to the actual T_k (at $T_k = 1000 \text{ K}$, the CH⁺ thermal line-width will only be 1.8 km s^{−1}, Nagy et al. 2013), nor to an enhanced gas turbulence. Detailed models of the CH⁺ excitation show that inclusion of formation and destruction rates in the level population determination affects the high- J levels (Godard & Cernicharo 2013). Indeed, using the CH⁺ $J = 3-2$ to $6-5$ intensities measured by *Herschel*/PACS toward the line survey position (Nagy et al. 2013), we derive $T_{\text{rot}}^{\text{PACS}} \approx 150 \text{ K}$. This is significantly warmer than T_{rot} of SH⁺, HOC⁺ and SO⁺.

CH⁺ is a light hydride (see Gerin et al. 2016, for a review) meaning that its lowest rotational transitions lie at far-IR frequencies. Therefore, its critical densities are very high ($n_{\text{cr}}(\text{CH}^+ 4-3) \approx 7 \times 10^9 \text{ H}_2 \text{ cm}^{-3}$, cf. $n_{\text{cr}}(\text{HOC}^+ 4-3) \approx 4 \times 10^6 \text{ H}_2 \text{ cm}^{-3}$ at $T_k = 200 \text{ K}$). Such values are much higher than the gas density in the Orion Bar. Thus, without an excitation mechanism other than collisions, one would expect $T_{\text{rot}}(\text{CH}^+) \ll T_{\text{rot}}(\text{HOC}^+)$. However, CH⁺ has a shorter lifetime than the other ions, and shorter than the timescale for inelastic collisional excitations. Hence, the higher $T_{\text{rot}}^{\text{PACS}}(\text{CH}^+)$ compared to the heavier ions must be related to a formation, and perhaps radiative, pumping mechanism. In particular, the dust continuum emission is much stronger in the far-IR than in the (sub)mm (Fig. D.1). As a consequence, the far-IR CH⁺ rotational transitions have larger radiative pumping rates than the (sub)mm transitions of the heavier ions. As an example, we derive $B_{3 \rightarrow 4} U_{3 \rightarrow 4}^{\text{Dust+CMB}}(\text{CH}^+)/B_{3 \rightarrow 4} U_{3 \rightarrow 4}^{\text{Dust+CMB}}(\text{HOC}^+) \approx 100$ (where B_{lu} is the stimulated absorption coefficient and U is the energy density produced by the dust emission and by the cosmic background; see Appendix D.1). Therefore, CH⁺ can be excited by radiation many times during its short lifetime (and during its mean-free-time for elastic collisions) so that it can remain kinetically hot (large velocity dispersion) and rotationally warm while it emits. On the other hand, the heavier ions are driven relatively more quickly toward smaller velocity dispersion by elastic collisions (narrower lines) and toward lower T_{rot} by inelastic collisions. For HOC⁺, we estimate that several collisional excitations take place during its lifetime (several hours). This subtle but important difference likely explains the narrower lines and lower T_{rot} of the heavier reactive ions, as well as their slightly different spatial distribution compared to CH⁺ (see Fig. 1e).

Acknowledgements. We thank A. Parikka for sharing her *Herschel* far-IR CH⁺ and OH line maps. We thank the ERC for funding support under grant ERC-2013-SyG-610256-NANOCOSMOS, and the Spanish MINECO under grants AYA2012-32032, AYA2016-75066-C2-1/2)-P and CSD2009-00038.

References

- Agúndez, M., Goicoechea, J. R., Cernicharo, J., Faure, A., & Roueff, E. 2010, *ApJ*, **713**, 662
 Andree-Labsch, S., Ossenkopf-Okada, V., & Röllig, M. 2017, *A&A*, **598**, A2
 Apponi, A. J., Pesch, T. C., & Ziurys, L. M. 1999, *ApJ*, **519**, L89
 Arab, H., Abergel, A., Habart, E., et al. 2012, *A&A*, **541**, A19

J. R. Goicoechea et al.: Spatially resolved images of reactive ions in the Orion Bar

- Asplund, M., Grevesse, N., & Sauval, A. J. 2005, in *Cosmic Abundances as Records of Stellar Evolution and Nucleosynthesis*, eds. T. G. Barnes, III, & F. N. Bash, *ASP Conf. Ser.*, **336**, 25
- Benz, A. O., Bruderer, S., van Dishoeck, E. F., et al. 2016, *A&A*, **590**, A105
- Bissantz, H., Andric, L., Hertzler, C., Foth, H.-J., & Linder, F. 1992, *Z. Phys. D Atoms Molecules Clusters*, **22**, 727
- Black, J. H. 1998, *Faraday Discussions*, **109**, 257
- Cernicharo, J., Liu, X.-W., González-Alfonso, E., et al. 1997, *ApJ*, **483**, L65
- Cuadrado, S., Goicoechea, J. R., Pilleri, P., et al. 2015, *A&A*, **575**, A82
- Flower, D. R. 1999, *MNRAS*, **305**, 651
- Fuente, A., Rodríguez-Franco, A., García-Burillo, S., Martín-Pintado, J., & Black, J. H. 2003, *A&A*, **406**, 899
- Fuente, A., García-Burillo, S., Usero, A., et al. 2008, *A&A*, **492**, 675
- Gerin, M., Neufeld, D. A., & Goicoechea, J. R. 2016, *ARA&A*, **54**, 181
- Godard, B., & Cernicharo, J. 2013, *A&A*, **550**, A8
- Goicoechea, J. R., Pety, J., Gerin, M., et al. 2006, *A&A*, **456**, 565
- Goicoechea, J. R., Pety, J., Gerin, M., et al. 2009, *A&A*, **498**, 771
- Goicoechea, J. R., Joblin, C., Contursi, A., et al. 2011, *A&A*, **530**, L16
- Goicoechea, J. R., Pety, J., Cuadrado, S., et al. 2016, *Nature*, **537**, 207
- Hierl, P. M., Morris, R. A., & Viggiano, A. A. 1997, *J. Chem. Phys.*, **106**, 10145
- Hollenbach, D. J., & Tielens, A. G. G. M. 1999, *Rev. Mod. Phys.*, **71**, 173
- Kaplan, K. F., Dinerstein, H. L., Oh, H., et al. 2017, *ApJ*, **838**, 2
- Le Petit, F., Nehmé, C., Le Bourlot, J., & Roueff, E. 2006, *ApJS*, **164**, 506
- Lique, F., Spielfiedel, A., & Cernicharo, J. 2006, *A&A*, **451**, 1125
- Megeath, S. T., Gutermuth, R., Muzerolle, J., et al. 2012, *AJ*, **144**, 192
- Menten, K. M., Reid, M. J., Forbrich, J., & Brunthaler, A. 2007, *A&A*, **474**, 515
- Müller, H. S. P., Goicoechea, J. R., Cernicharo, J., et al. 2014, *A&A*, **569**, L5
- Nagy, Z., Choi, Y., Ossenkopf-Okada, V., et al. 2017, *A&A*, **599**, A22
- Nagy, Z., Van der Tak, F. F. S., Ossenkopf, V., et al. 2013, *A&A*, **550**, A96
- Parikka, A., Habart, E., Bernard-Salas, J., et al. 2017, *A&A*, **599**, A20
- Pellegrini, E. W., Baldwin, J. A., Ferland, G. J., Shaw, G., & Heathcote, S. 2009, *ApJ*, **693**, 285
- Pety, J., & Rodríguez-Fernández, N. 2010, *A&A*, **517**, A12
- Salgado, F., Berné, O., Adams, J. D., et al. 2016, *ApJ*, **830**, 118
- Smith, M. A., Schlemmer, S., von Richthofen, J., & Gerlich, D. 2002, *ApJ*, **578**, L87
- Sternberg, A., & Dalgarno, A. 1995, *ApJS*, **99**, 565
- Stoerzer, H., Stutzki, J., & Sternberg, A. 1995, *A&A*, **296**, L9
- Turner, B. E. 1996, *ApJ*, **468**, 694
- van der Werf, P. P., Stutzki, J., Sternberg, A., & Krabbe, A. 1996, *A&A*, **313**, 633
- Walmsley, C. M., Natta, A., Oliva, E., & Testi, L. 2000, *A&A*, **364**, 301
- Zanchet, A., Agúndez, M., Herrero, V. J., Aguado, A., & Roncero, O. 2013, *AJ*, **146**, 125

A&A 601, L9 (2017)

Appendix A: Spectroscopic parameters of the observed lines**Table A.1.** Frequencies, energy levels, Einstein coefficients and line parameters of the ALMA-ACA spectra averaged over the observed field.

Species	Transition	Frequency (MHz)	E_u/k (K)	A_{ul} (s^{-1})	$\int T dv$ (K km s $^{-1}$)	$v_{peak,LSR}$ (km s $^{-1}$)	Δv (km s $^{-1}$)	T_{peak} (K)
CO	3–2	345 795.9899	33.2	2.50×10^{-6}	625.67 (0.72)	10.1 (0.1)	4.6 (0.1)	127.41
HCO $^+$	4–3	356 734.2246	42.8	3.55×10^{-3}	33.93 (0.25)	10.5 (0.1)	3.1 (0.1)	10.41
H 13 CO $^+$	4–3	346 998.3360	41.6	3.27×10^{-3}	0.56 (0.01)	10.7 (0.1)	2.4 (0.1)	0.22
HOC $^+$	4–3	357 922.0140	42.9	1.82×10^{-3}	0.21 (0.01)	10.6 (0.4)	2.8 (0.1)	0.07
SH $^+$	1_0-0_1 $1/2-3/2$	345 944.4205	11.6	2.30×10^{-4}	0.30 (0.01)	10.6 (0.2)	2.7 (0.1)	0.10
SO $^+$	$15/2^- - 13/2^+$	347 740.0110	70.1	1.19×10^{-3}	0.36 (0.01)	10.6 (0.1)	2.1 (0.1)	0.16
SO	8_9-7_8	346 528.5280	78.8	5.38×10^{-4}	3.50 (0.08)	10.3 (0.2)	1.8 (0.1)	1.81

Notes. Velocity-integrated line intensities, LSR velocity of the line emission peaks, line-widths and line temperature peaks obtained by a Gaussian fitting procedure. Parentheses indicate the fit uncertainty.

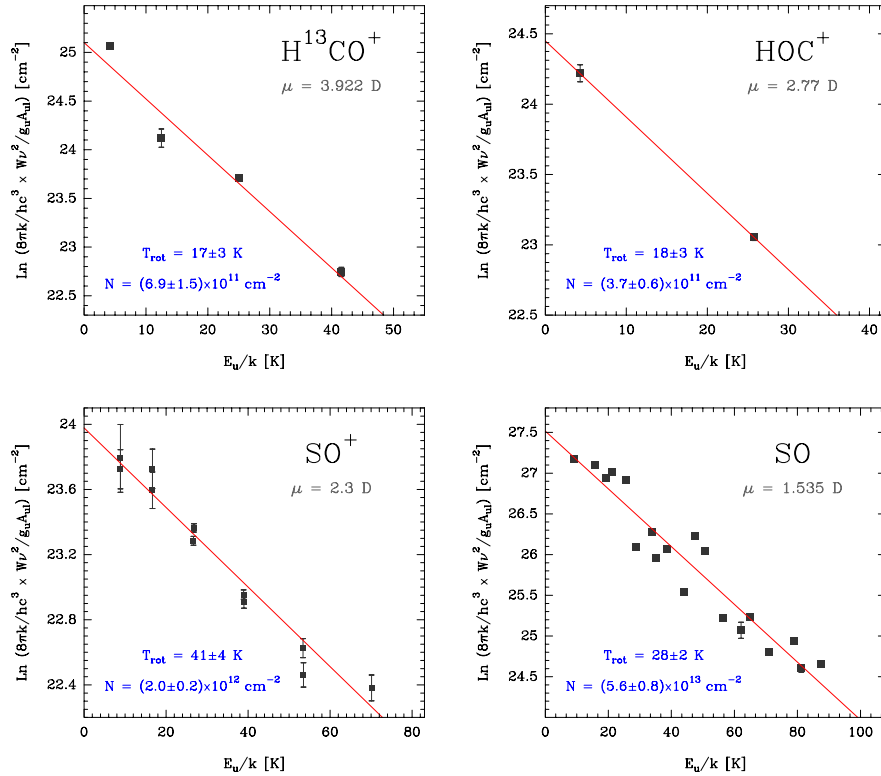
Appendix B: Rotational population diagrams and column densities

Fig. B.1. Rotational diagrams obtained from IRAM 30 m observations toward the line survey position (Cuadrado et al. 2015) assuming optically thin emission and uniform beam filling. Fitted values of T_{rot} , column density, and their respective uncertainties are indicated.

Table B.1. Rotational temperatures (T_{rot}) and column densities (N) inferred from IRAM 30 m observations toward the line survey position.

	Uniform beam filling		10''-width filament	
	T_{rot} [K]	$N(X)$ [cm $^{-2}$]	T_{rot} [K]	$N(X)$ [cm $^{-2}$]
H 13 CO $^+$	17 ± 3	$(6.9 \pm 1.5) \times 10^{11}$	13 ± 2	$(1.4 \pm 0.5) \times 10^{12}$
HOC $^+$	18 ± 3	$(3.7 \pm 0.6) \times 10^{11}$	11 ± 2	$(7.8 \pm 1.2) \times 10^{11}$
SO $^+$	41 ± 4	$(2.0 \pm 0.2) \times 10^{12}$	29 ± 3	$(3.1 \pm 0.5) \times 10^{12}$
SO	28 ± 2	$(5.6 \pm 0.8) \times 10^{13}$	22 ± 2	$(1.1 \pm 0.2) \times 10^{14}$
SH $^+$			~ 10	$(1.5 \pm 0.5) \times 10^{13}$

Appendix C: Chemical destruction timescales

In this Appendix we use the rates of the chemical reactions (included in our PDR model) that lead to the destruction of reactive ions, to compute their characteristic destruction timescales in the Orion Bar. For simplicity we adopt $T_k = T_e = 300$ K.

The destruction timescales of CH^+ by reactive collisions with H_2 and H are $\tau_{\text{CH}^+}(\text{H}_2) \approx 4.6 \text{ h } (10^5 \text{ cm}^{-3}/n_{\text{H}}) f_{\text{H}_2}^{-1}$ and $\tau_{\text{CH}^+}(\text{H}) \approx 3.7 \text{ h } (10^5 \text{ cm}^{-3}/n_{\text{H}}) (1 - f_{\text{H}_2})^{-1}$, respectively. In these relations, $f_{\text{H}_2} = 2n(\text{H}_2)/[n(\text{H}) + 2n(\text{H}_2)]$ is the molecular gas fraction (<1 close to the DF of PDRs). The CH^+ destruction timescale by dissociative recombination is slower, $\tau_{\text{CH}^+}(\text{e}^-) \approx 185 \text{ h } (10^5 \text{ cm}^{-3}/n_{\text{H}}) (10^{-4}/x_e)$.

On the other hand, SH^+ slowly reacts with H_2 (the reaction is very endothermic). The relevant destruction timescales are $\tau_{\text{SH}^+}(\text{H}) \approx 25 \text{ h } (10^5 \text{ cm}^{-3}/n_{\text{H}}) (1 - f_{\text{H}_2})^{-1}$ and $\tau_{\text{SH}^+}(\text{e}^-) \approx 111 \text{ h } (10^5 \text{ cm}^{-3}/n_{\text{H}}) (10^{-4}/x_e)$.

For HOC^+ we derive $\tau_{\text{HOC}^+}(\text{H}_2) \approx 14.6 \text{ h } (10^5 \text{ cm}^{-3}/n_{\text{H}}) f_{\text{H}_2}^{-1}$ and $\tau_{\text{HOC}^+}(\text{e}^-) \approx 252 \text{ h } (10^5 \text{ cm}^{-3}/n_{\text{H}}) (10^{-4}/x_e)$.

SO^+ lifetime is longer. The reaction of SO^+ with H is very endothermic. Close to the DF, SO^+ destruction is dominated by dissociative recombination, with $\tau_{\text{SO}^+}(\text{e}^-) \approx 139 \text{ h } (10^5 \text{ cm}^{-3}/n_{\text{H}}) (10^{-4}/x_e)$, and by photodissociation, with $\tau_{\text{SO}^+}(\text{ph}) = 27.8 \text{ h } e^{+1.7 A_V}$ for $\chi = 10^4$. In our PDR models we assume $\kappa_{\text{SO}^+}(\text{ph}) = \chi \times 10^{-9} e^{-1.7 A_V} (\text{s}^{-1})$, which is ≈ 1000 , ≈ 10 , ≈ 5 , and ≈ 4 times faster than the adopted $\kappa_{\text{HCO}^+}(\text{ph})$, $\kappa_{\text{CH}^+}(\text{ph})$, $\kappa_{\text{OH}^+}(\text{ph})$, and $\kappa_{\text{SH}^+}(\text{ph})$ photodissociation rates, respectively (at $A_V = 1$). A summary of the relevant destruction timescales is presented in Table D.1.

Appendix D: Collisional and radiative excitation of H^{13}CO^+ , HOC^+ , SH^+ , and SO^+

To estimate the physical conditions of the reactive ions emitting gas, we solved the statistical equilibrium equations and radiative transfer using a non-local-thermodynamic equilibrium code (Goicoechea et al. 2006). In PDRs, the high electron density (up to $n(\text{e}^-) \approx x(\text{C}^+) n_{\text{H}} \approx 10^{-4} n_{\text{H}}$ for standard cosmic ray ionization rates) plays an important role in the collisional excitation of molecular ions and competes with collisions with H_2 and H . This is because the associated collisional excitation rate coefficients $\gamma_{lu}(\text{e}^-) (\text{cm}^3 \text{ s}^{-1})$ can be large, up to 10^4 times $\gamma_{lu}(\text{H}_2)$, and thus H_2 and e^- collisional rates (s^{-1}) become comparable if the ionization fraction $n(\text{e}^-)/n_{\text{H}}$ is high, $x_e \approx 10^{-5} - 10^{-4}$. Here we used published (or estimated by us) inelastic collisional rate coefficients¹,

¹ – For H^{13}CO^+ and HOC^+ ($^1\Sigma^-$ ground electronic states) we used $\text{HCO}^+ - \text{H}_2$ de-excitation rates of Flower (1999), and specific $\text{HCO}^+ - \text{e}^-$ and $\text{HOC}^+ - \text{e}^-$ de-excitation rates (presented in Fuente et al. 2008, and references therein). We computed the respective collisional excitation rates through detailed balance.

– For SH^+ ($^3\Sigma^-$) there are no published collisional rate coefficients. For $\text{SH}^+ - \text{H}_2$ we simply scaled radiative rates (J. Black, priv. comm.) for a 10–5000 K temperature range. For $\text{SH}^+ - \text{e}^-$ collisions we used rate coefficients calculated in the Coulomb-Born approximation for the 10–1000 K temperature range (J. Black, priv. comm.).

– For SO^+ ($^2\Pi$) there are no published collisional rates. Here we modeled rotational levels in the $^2\Pi_{1/2}$ ladder only (the $^2\Pi_{3/2}$ ladder lies 525 K above the ground, much higher than the $T_{\text{rot}}(\text{SO}^+)$ inferred from our observations) and neglected Λ -doubling transitions. For $\text{SO}^+ - \text{H}_2$, we used CS-He rates of Lique et al. (2006) (CS has a similar molecular weight and dipole moment: 44 and 2.0 D, compared to SO^+ : 48 and 2.3 D. This is the adopted SO^+ dipole moment after Turner 1996). Rate coefficients were multiplied by 2 to account for the ionic character of SO^+ .

and we adopted $n(\text{e}^-) = 10 \text{ cm}^{-3}$ and $n_{\text{H}} \approx 10^4 - 10^6 \text{ cm}^{-3}$ in the models, the expected range of densities in the region.

In addition to inelastic collisions, we included radiative excitation by absorption of the 2.7 K cosmic background and by the (external) dust radiation field in the region. The latter is modelled as a modified blackbody emission with an effective dust temperature of $T_d = 50$ K, spectral emissivity index of $\beta = 1.6$, and a dust opacity (τ_d) of ≈ 0.03 at a reference wavelength of $\lambda = 160 \mu\text{m}$. The resulting continuum levels (Fig. D.1) reproduce the far-IR photometric measurements toward the Orion Bar; we refer to Arab et al. (2012). These authors estimated $T_d \approx 50$ K inside the Bar and $T_d \approx 70$ K immediately in front. Our calculations include thermal, turbulent, and line opacity broadening. The non-thermal velocity dispersion that reproduces the observed line-widths is $\sigma \approx 1 \text{ km s}^{-1}$ (with full width at half maximum of 2.355σ).

By varying N , n_{H} and T_k , we tried to reproduce the H^{13}CO^+ , HOC^+ , SH^+ , and SO^+ line intensities observed by ALMA-ACA toward the line survey position as well as the intensities of the other rotational lines detected with the IRAM-30 m telescope (correcting them by a dilution factor that takes into account the beam size at each frequency and an intrinsic $10''$ -wide Gaussian filament shape of the emission). Our best models fit the intensities by less than a factor of 2. They also reproduce (± 3 K) the T_{rot} inferred from the rotational population diagrams for a $10''$ -wide filament (see Table B.1). For H^{13}CO^+ , HOC^+ , and SO^+ , we obtain $n(\text{H}_2) \approx 10^5 \text{ cm}^{-3}$, $n(\text{e}^-) = 10 \text{ cm}^{-3}$, and $T_k \gtrsim 200$ K. These conditions agree with those inferred by Nagy et al. (2017) for the H^{12}CO^+ rotationally excited emission ($J = 6-5$ to $11-10$) observed by *Herschel*/HIFI.

For SH^+ , we reproduce the line intensities observed by ALMA-ACA at ~ 345 GHz, and by *Herschel*/HIFI at ~ 526 GHz Nagy et al. (2013; significantly diluted in the large HIFI beam according to our ALMA-ACA images), if the gas is an order of magnitude denser, $\sim 10^6 \text{ cm}^{-3}$ (similar to Nagy et al. 2013 as they used the same estimated collisional rates).

D.1. Radiative pumping rates (CH^+ vs. HOC^+)

To support our interpretation, here we compare the collisional and radiative pumping rates of CH^+ and HOC^+ rotational lines with their chemical destruction timescales. The inelastic collisional excitation rate (C_{lu}) is given by

$$C_{lu} = n(\text{H}_2) \gamma_{lu}(\text{H}_2) + n(\text{e}^-) \gamma_{lu}(\text{e}^-) \quad [\text{s}^{-1}], \quad (\text{D.1})$$

where we assume that H_2 and e^- are the only collisional partners. The upward excitation collisional coefficients $\gamma_{lu} (\text{cm}^3 \text{ s}^{-1})$ are computed from the de-excitation coefficients by detailed balance

$$\gamma_{lu} = \gamma_{ul} \frac{g_u}{g_l} e^{-T^*/T_k} \quad [\text{cm}^3 \text{ s}^{-1}], \quad (\text{D.2})$$

where $T^* = h\nu/k$ is the equivalent temperature at the frequency ν of the transition. The continuum energy density in the cloud at a given frequency is

$$U^{\text{Dust+CMB}} = \beta [U(T_d) + U(T_{\text{cmb}})], \quad (\text{D.3})$$

where $U(T_d)$ is the contribution from the external dust radiation field, and $U(T_{\text{cmb}} = 2.73 \text{ K})$ is the cosmic background. β is the

For $\text{SO}^+ - \text{e}^-$, we used rate coefficients calculated in the Coulomb-Born approximation for the 10–1000 K range (J. Black, priv. comm.).

A&A 601, L9 (2017)

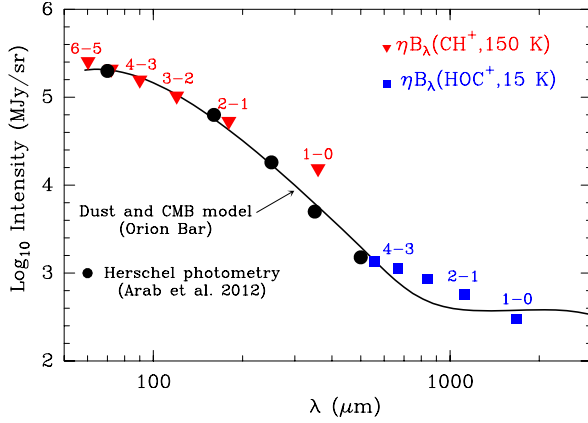


Fig. D.1. Dust continuum emission (with $T_d = 50$ K) and cosmic millimeter background model used in the excitation calculation. Black circles show *Herschel*'s photometric observations toward the Orion Bar. Red triangles show the wavelength position of CH^+ rotational lines. Their intensity scale is that of a black body at 150 K ($\approx T_{\text{rot}}^{\text{PACS}}$) scaled by an arbitrary dilution factor η . Blue squares show the position of HOC^+ rotational lines. Their intensity scale is that of a black body at 15 K ($\approx T_{\text{rot}}^{\text{IRAM 30 m}}$) scaled by a different arbitrary dilution factor.

photon escape probability that tends to 1 if the line opacity tends to 0. The radiative pumping rate can be written as

$$B_{\text{lu}} U^{\text{Dust+CMB}} = \beta A_{\text{ul}} \left[\frac{1 - e^{-\tau_d}}{e^{T^*/T_d} - 1} + \frac{1}{e^{T^*/T_{\text{cmb}}} - 1} \right] \quad [\text{s}^{-1}], \quad (\text{D.4})$$

where B_{lu} and A_{ul} are the Einstein coefficients for stimulated absorption and for spontaneous emission, respectively. As an example of the excitation differences between CH^+ and the heavier reactive ions, we note that the CH^+ 4–3 line lies at a far-IR wavelength ($\lambda \approx 90 \mu\text{m}$) where the intensity of the continuum emission toward the Orion Bar is $\gtrsim 200$ times stronger than that at the submm HOC^+ 4–3 line wavelength ($\lambda \approx 837 \mu\text{m}$; see Fig. D.1).

We adopt $n(\text{H}_2) = 10^5 \text{ cm}^{-3}$, $n(e^-) = 10 \text{ cm}^{-3}$, $T_k = T_e = 200 \text{ K}$, and our model of the continuum emission (Fig. D.1). With these parameters, using the appropriate collisional rate

coefficients (see Nagy et al. 2013; Godard & Cernicharo 2013, for detailed CH^+ excitation models), and in the $\beta = 1$ limit, we compute the following collisional and radiative pumping rates

$$C_{01}(\text{CH}^+) = 3.7 \times 10^{-5} \text{ s}^{-1} \quad (\tau \approx 7.6 \text{ h}), \quad (\text{D.5})$$

$$B_{01} U^{\text{Dust+CMB}}(\text{CH}^+) = 1.3 \times 10^{-4} \text{ s}^{-1} \quad (\tau \approx 2.2 \text{ h}), \quad (\text{D.6})$$

$$C_{34}(\text{CH}^+) = 5.3 \times 10^{-6} \text{ s}^{-1} \quad (\tau \approx 52.7 \text{ h}), \quad (\text{D.7})$$

$$B_{34} U^{\text{Dust+CMB}}(\text{CH}^+) = 2.1 \times 10^{-3} \text{ s}^{-1} \quad (\tau \approx 0.1 \text{ h}), \quad (\text{D.8})$$

for CH^+ , and

$$C_{01}(\text{HOC}^+) = 1.2 \times 10^{-4} \text{ s}^{-1} \quad (\tau \approx 2.3 \text{ h}), \quad (\text{D.9})$$

$$B_{01} U^{\text{Dust+CMB}}(\text{HOC}^+) = 1.7 \times 10^{-5} \text{ s}^{-1} \quad (\tau \approx 16.4 \text{ h}), \quad (\text{D.10})$$

$$C_{34}(\text{HOC}^+) = 7.9 \times 10^{-5} \text{ s}^{-1} \quad (\tau \approx 3.5 \text{ h}), \quad (\text{D.11})$$

$$B_{34} U^{\text{Dust+CMB}}(\text{HOC}^+) = 1.6 \times 10^{-5} \text{ s}^{-1} \quad (\tau \approx 16.9 \text{ h}), \quad (\text{D.12})$$

for HOC^+ . The quantities in parenthesis (τ) represent the corresponding timescale for each excitation process (see Table D.2). In the case of reactive molecular ions, these rates compete with their chemical destruction timescales (derived in Appendix C). Adopting a gas density of 10^5 cm^{-3} , $f_{\text{H}_2}=0.5$ and $x_e = 10^{-4}$ for the Orion Bar, the total CH^+ and HOC^+ chemical destruction timescales are $\tau_D(\text{CH}^+) \approx 4 \text{ h}$ and $\tau_D(\text{HOC}^+) \approx 26 \text{ h}$ (see Table D.1). Comparing $\tau_D(\text{CH}^+)$ with the timescales for collisional and radiative excitation shows that CH^+ molecules are excited by radiation many times during its short lifetime, but not by collisions. Hence, CH^+ can remain rotationally warm while it emits. Interestingly, the far-IR CH^+ lines observed by PACS ($J = 3-2$ to $6-5$, Nagy et al. 2013) follow roughly the same functional shape, $\propto B_\lambda(T_{\text{rot}}^{\text{PACS}} \approx 50 \text{ K})$, of the warm dust continuum emission (with $T_d \approx 50-70 \text{ K}$; Fig. D.1). Because for CH^+ radiative processes are faster than collisional processes (Table D.2), CH^+ molecules might have equilibrated with the dust radiation field they absorb (Black 1998). However, Godard & Cernicharo (2013) conclude that the high- J CH^+ lines in the Bar are mostly driven by formation pumping; thus, naturally producing warm rotational temperatures. On the other hand, comparing $\tau_D(\text{HOC}^+)$ with the representative timescales for collisional and radiative excitation shows that HOC^+ molecules (and likely the other heavier ions as well) are excited by collisions several times during their lifetime. Inelastic collisions thus can drive their rotational populations to lower T_{rot} relatively fast.

J. R. Goicoechea et al.: Spatially resolved images of reactive ions in the Orion Bar

Table D.1. Timescales, in hours, for chemical destruction by reactive collisions with H_2 , H , e^- and by FUV photodissociation.

Ion	$\tau(\text{H}_2)^a$	$\tau(\text{H})^a$	$\tau(\text{e}^-)^a$	$\tau(\text{photodiss.})^b$
CH^+ $\tau_{\text{D}} \approx 4 \text{ h}^c$	$4.6 \text{ h } (10^5 \text{ cm}^{-3}/n_{\text{H}}) f_{\text{H}_2}^{-1}$	$3.7 \text{ h } (10^5 \text{ cm}^{-3}/n_{\text{H}}) (1 - f_{\text{H}_2})^{-1}$	$185 \text{ h } (10^5 \text{ cm}^{-3}/n_{\text{H}}) (10^{-4}/x_{\text{e}})$	$84.2 \text{ h e}^{+2.94 A_V}$
HOC^+ $\tau_{\text{D}} \approx 26 \text{ h}^c$	$14.6 \text{ h } (10^5 \text{ cm}^{-3}/n_{\text{H}}) f_{\text{H}_2}^{-1}$	—	$252 \text{ h } (10^5 \text{ cm}^{-3}/n_{\text{H}}) (10^{-4}/x_{\text{e}})$	$5144 \text{ h e}^{+3.32 A_V}$
SH^+ $\tau_{\text{D}} \approx 46 \text{ h}^c$	—	$25 \text{ h } (10^5 \text{ cm}^{-3}/n_{\text{H}}) (1 - f_{\text{H}_2})^{-1}$	$111 \text{ h } (10^5 \text{ cm}^{-3}/n_{\text{H}}) (10^{-4}/x_{\text{e}})$	$111 \text{ h e}^{+1.66 A_V}$
SO^+ $\tau_{\text{D}} \approx 73 \text{ h}^c$	—	—	$139 \text{ h } (10^5 \text{ cm}^{-3}/n_{\text{H}}) (10^{-4}/x_{\text{e}})$	$27.8 \text{ h e}^{+1.70 A_V}$

Notes. ^(a) Assuming $T_{\text{k}} = T_{\text{e}} = 300 \text{ K}$. ^(b) For a FUV-radiation field of $\chi = 10^4$. ^(c) Total destruction timescale (τ_{D}) at $A_V = 1$ assuming $n_{\text{H}} = 10^5 \text{ cm}^{-3}$ and $f_{\text{H}_2} = 0.5$. For CH^+ (HOC^+), τ_{D} is shorter (longer) than the timescale for non-reactive collisions in their low-lying rotational levels (see Table D.2.).

Table D.2. Representative timescales for non-reactive inelastic collisions and for radiative excitations of CH^+ and HOC^+ low-lying levels.

Ion	$\tau_{0 \rightarrow 1}(\text{coll.})^a$	$\tau_{3 \rightarrow 4}(\text{coll.})^a$	$\tau_{0 \rightarrow 1}(\text{rad.})^b$	$\tau_{3 \rightarrow 4}(\text{rad.})^b$
$\text{CH}^+ J_{\text{l}} \rightarrow J_{\text{u}}$	7.6 h	52.7 h	2.2 h	0.1 h
$\text{HOC}^+ J_{\text{l}} \rightarrow J_{\text{u}}$	2.3 h	3.5 h	16.4 h	16.9 h

Notes. ^(a) Adopting $n(\text{H}_2) = 10^5 \text{ cm}^{-3}$ and $n(\text{e}^-) = 10 \text{ cm}^{-3}$. ^(b) Using our model of the continuum emission in the Orion Bar (see Fig. D.1).

10.5. Perfiles de línea de los iones reactivos

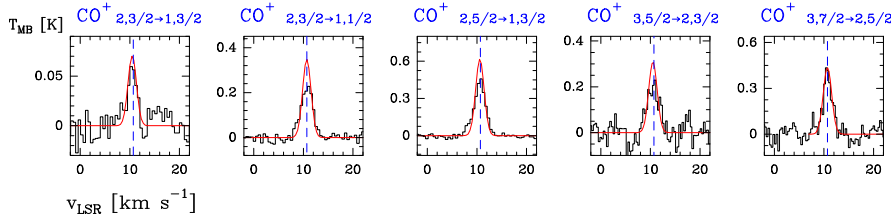


Figura 10.3: Líneas detectadas de CO^+ (en negro). Superpuesto en rojo se incluye un modelo creado con MADEX asumiendo una única temperatura de excitación para la población de niveles rotacionales ($N = 1.9 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y $T_{\text{rot}} = 16 \text{ K}$).

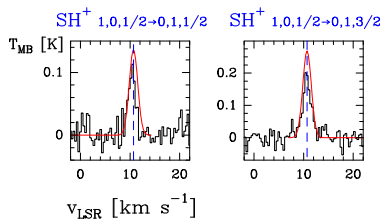


Figura 10.4: Líneas detectadas de SH^+ (en negro). Superpuesto en rojo se incluye un modelo creado con MADEX asumiendo una única temperatura de excitación para la población de niveles rotacionales ($N = 1.0 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ y $T_{\text{rot}} = 10 \text{ K}$).

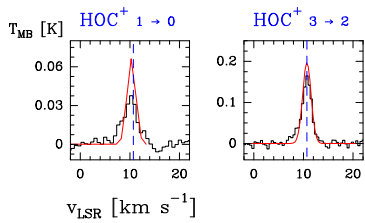


Figura 10.5: Líneas detectadas de HOC^+ (en negro). Superpuesto en rojo se incluye un modelo creado con MADEX asumiendo una única temperatura de excitación para la población de niveles rotacionales ($N = 3.7 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ y $T_{\text{rot}} = 18 \text{ K}$).

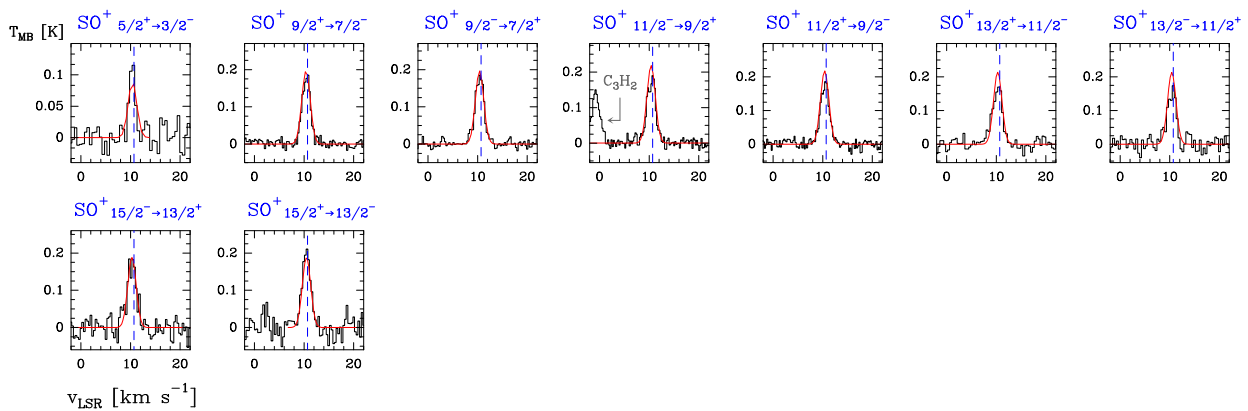


Figura 10.6: Líneas detectadas de SO^+ (en negro). Superpuesto en rojo se incluye un modelo creado con MADEX asumiendo una única temperatura de excitación para la población de niveles rotacionales ($N = 2.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y $T_{\text{rot}} = 41 \text{ K}$).

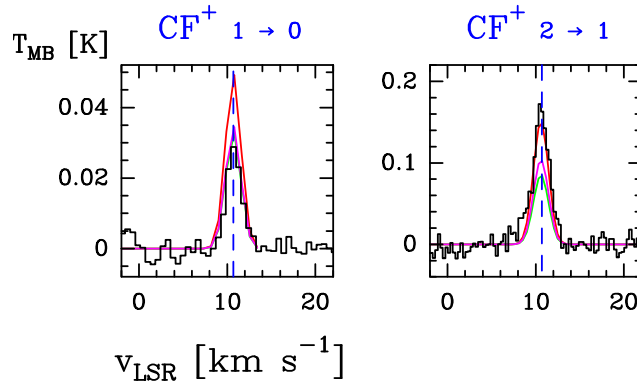


Figura 10.7: Líneas detectadas de CF^+ (en negro). Superpuesto en rojo, verde y rosa se incluyen diferentes modelos creados con MADEx (ver texto en Sección 10.2). La línea de CF^+ $J = 2 \rightarrow 1$ está solapada con A- CH_3CHO $J_{K_a, K_c} = 11_{1,11} \rightarrow 10_{1,10}$.

10.6. Parámetros espectroscópicos y observacionales de los iones reactivos

Tabla 10.1: Parámetros de línea del ion reactivo CO^+ .

Transición	Frecuencia	E_u/k	A_{ul}	S_{ij}	g_u	$\int T_{\text{MB}} dv$	v_{LSR}	Δv	T_{MB}	S/N
$(N, F)_u \rightarrow (N, F)_l$	[MHz]	[K]	[s^{-1}]			[K km s^{-1}]	[km s^{-1}]	[km s^{-1}]	[K]	
$2,3/2 \rightarrow 1,3/2$	235380.046 ^F	17	6.87×10^{-5}	0.27	4	0.13(0.02)	10.5(0.2)	2.0(0.4)	0.06	5
$2,3/2 \rightarrow 1,1/2$	235789.641 ^F	17	3.45×10^{-4}	1.3	4	0.68(0.03)	10.7(<0.1)	2.8(0.1)	0.23	16
$2,5/2 \rightarrow 1,3/2$	236062.553 ^F	17	4.16×10^{-4}	2.4	6	1.23(0.03)	10.6(<0.1)	2.7(0.1)	0.44	22
$3,5/2 \rightarrow 2,3/2$	353741.312 ^F	34	1.40×10^{-3}	2.4	6	0.63(0.07)	10.5(0.2)	2.9(0.3)	0.20	5
$3,7/2 \rightarrow 2,5/2$	354014.247 ^F	34	1.50×10^{-3}	3.4	8	0.91(0.07)	10.7(0.1)	2.1(0.2)	0.40	9

Notas. Frecuencias, E_u , A_{ul} , S_{ij} y g_u del catálogo CDMS.

Tabla 10.2: Parámetros de línea del ion reactivo SH^+ .

Transición	Frecuencia	E_u/k	A_{ul}	S_{ij}	g_u	$\int T_{\text{MB}} dv$	v_{LSR}	Δv	T_{MB}	S/N
$(N, J, F)_u \rightarrow (N, J, F)_l$	[MHz]	[K]	[s^{-1}]			[mK km s^{-1}]	[km s^{-1}]	[km s^{-1}]	[mK]	
$1,0,1/2 \rightarrow 0,1,1/2$	345858.195 ^F	11.5	1.15×10^{-4}	0.29	2	177(21)	10.5(0.1)	1.6(0.2)	101	6
$1,0,1/2 \rightarrow 0,1,3/2$	345944.420 ^F	11.5	2.30×10^{-4}	0.58	2	393(26)	10.7(0.1)	2.0(0.2)	184	10

Notas. Frecuencias, E_u , A_{ul} , S_{ij} y g_u de Muller et al. (2014) y CDMS.

Tabla 10.3: Parámetros de línea del ion reactivo HOC^+ .

Transición	Frecuencia	E_u/k	A_{ul}	S_{ij}	g_u	$\int T_{\text{MB}} dv$	v_{LSR}	Δv	T_{MB}	S/N
$J_u \rightarrow J_l$	[MHz]	[K]	[s^{-1}]			[mK km s^{-1}]	[km s^{-1}]	[km s^{-1}]	[mK]	
$1 \rightarrow 0$	89487.391 ^F	4.3	2.13×10^{-5}	1.0	3	136(8)	10.3(0.1)	3.8(0.3)	33	11
$3 \rightarrow 2$	268451.151 ^F	25.8	7.40×10^{-4}	3.0	7	378(9)	10.7(<0.1)	2.3(0.1)	158	24

Notas. Ajuste de todas las líneas rotacionales presentadas por Amano et al. (2000).

Tabla 10.4: Parámetros de línea del ion reactivo $\text{SO}^+ \ ^2\Pi_{1/2} \rightarrow \ ^2\Pi_{1/2}$.

Transición	Frecuencia	E_u/k	A_{ul}	S_{ij}	g_u	$\int T_{\text{MB}} dv$	v_{LSR}	Δv	T_{MB}	S/N
$J_u^p \rightarrow J_l^p$	[MHz]	[K]	[s^{-1}]			[mK km s^{-1}]	[km s^{-1}]	[km s^{-1}]	[mK]	
$5/2^+ \rightarrow 3/2^-$	115804.405 ^F	8.9	3.77×10^{-5}	2.36	6	173(20)	10.4(<0.1)	1.3(0.2)	124	8
$5/2^- \rightarrow 3/2^+$	116179.947 ^W	8.9	3.80×10^{-5}	2.36	6	186(75)	—	—	—	3
$7/2^- \rightarrow 5/2^+$	162198.598 ^W	16.7	1.11×10^{-4}	3.37	8	347(42)	—	—	—	9
$7/2^+ \rightarrow 5/2^-$	162574.058 ^W	16.7	1.12×10^{-4}	3.37	8	305(34)	—	—	—	9
$9/2^+ \rightarrow 7/2^-$	208590.016 ^F	26.7	2.45×10^{-4}	4.37	10	371(10)	10.4(<0.1)	1.9(0.1)	181	20
$9/2^- \rightarrow 7/2^+$	208965.420 ^F	26.8	2.46×10^{-4}	4.37	10	402(10)	10.4(<0.1)	2.1(0.1)	182	22
$11/2^- \rightarrow 9/2^+$	254977.935 ^F	38.9	4.57×10^{-4}	5.37	12	400(11)	10.4(<0.1)	2.1(0.1)	181	17
$11/2^+ \rightarrow 9/2^-$	255353.237 ^F	39.0	4.59×10^{-4}	5.37	12	382(13)	10.4(<0.1)	2.0(0.1)	177	15
$13/2^+ \rightarrow 11/2^-$	301361.501 ^F	53.4	7.66×10^{-4}	6.36	14	403(23)	10.3(<0.1)	2.3(0.2)	164	13
$13/2^- \rightarrow 11/2^+$	301736.791 ^F	53.5	7.68×10^{-4}	6.36	14	342(25)	10.4(<0.1)	2.0(0.2)	163	11
$15/2^- \rightarrow 13/2^+$	347740.011 ^F	70.1	1.19×10^{-3}	7.35	16	421(33)	10.3(<0.1)	2.3(0.2)	172	5
$15/2^+ \rightarrow 13/2^-$	348115.221 ^F	70.2	1.19×10^{-3}	7.35	16	426(33)	10.5(<0.1)	1.9(0.2)	207	8

Notas. Frecuencias, E_u , A_{ul} , S_{ij} y g_u del catálogo JPL.

Tabla 10.5: Parámetros de línea del ion reactivo CF^+ .

Transición	Frecuencia	E_u/k	A_{ul}	S_{ij}	g_u	$\int T_{\text{MB}} dv$	v_{LSR}	Δv	T_{MB}	S/N
$J_u \rightarrow J_l$	[MHz]	[K]	[s^{-1}]			[mK km s^{-1}]	[km s^{-1}]	[km s^{-1}]	[mK]	
$1 \rightarrow 0$	102587.532 ^F	4.9	4.81×10^{-6}	1	3	56(5)	10.7(<0.1)	1.9(0.2)	26	10
$2 \rightarrow 1$	205170.506 ^{F,A}	14.8	4.62×10^{-5}	2	5	386(13)	10.6(<0.1)	2.3 (0.1)	157	20

Notas. Ajuste de todas las líneas rotacionales presentadas por Plummer et al. 1986, Cazzoli et al. 2010 y

Cazzoli et al. 2012. ^A Solapada con $\text{A-CH}_3\text{CHO } 11_{1,11} \rightarrow 10_{1,10}$.

Capítulo 11

Líneas de recombinación

11.1. Formación de las líneas de recombinación

En el barrido espectral de la Barra de Orión se han detectado también un gran número de líneas de recombinación de hidrógeno (57 líneas) y helio (6 líneas) lo que indica la presencia de gas ionizado en la región subtendida por el haz del telescopio. También se han detectado 19 líneas de recombinación de carbono, las cuales se originan en el frente de disociación de la Barra de Orión.

Las líneas de recombinación de H y He pertenecen a la región HII que están generando las estrellas del Trapecio en la Nebulosa de Orión. Estas líneas están incluidas en nuestro barrido espectral porque la región HII se encuentra en la línea de visión de la Barra de Orión (emisión captada por el haz del telescopio a 3 mm y 2 mm; Wyrowski et al. 1997; Boughton 1978). Las estrellas del Trapecio emiten radiación UV que ioniza los átomos de hidrógeno ($E < 13.6$ eV) y forma a su alrededor una región llamada HII ya que está constituida fundamentalmente de hidrógeno ionizado. En las regiones HII los átomos de hidrógeno se están recombinando continuamente, es decir, el átomo de hidrógeno ionizado captura un electrón y se vuelve a hacer neutro, y puede volver a ser ionizado por la radiación UV procedente de la estrella. Al recombinarse, el electrón puede quedar en un nivel cuántico excitado cualquiera y desciende en casca-

da perdiendo energía y emitiendo fotones hasta que alcanza el nivel fundamental. Los fotones emitidos al producirse transiciones entre los distintos niveles cuánticos dan lugar a las líneas de recombinación que puede caer dentro de la región UV, visible, IR o radio, dependiendo de la diferencia de energía entre los niveles. Gracias a la resolución espectral en el dominio milimétrico podemos resolver los perfiles de las líneas de recombinación y estudiar la cinemática del gas ionizado.

La mayoría de la radiación estelar por debajo del límite Lyman ($E > 13.6$ eV) se escapa libre de la nebulosa HII y puede ionizar todos los elementos con potencial de ionización menor que 13.6 eV, como el carbono (11.26 eV) y el azufre (10.36 eV), que se encuentran en nubes de materia neutra próximas a regiones HII (ver Capítulo 3).

Para designar las líneas de recombinación se utiliza la siguiente nomenclatura: $Xn\Delta n$, siendo X el símbolo químico del elemento que produce la línea, n el nivel inferior de la transición y Δn la diferencia en el número cuántico principal entre el nivel superior e inferior de la transición utilizando letras griegas ($\alpha, \beta, \gamma, \delta, \epsilon, \dots$) para designar respectivamente a $\Delta n = 1, 2, 3, 4, \dots$. Así una línea producida por el átomo de hidrógeno al pasar de $n = 40$ a $n = 39$ será $H39\alpha$.

11.2. Líneas de recombinación en la Barra de Orión

Las líneas de recombinación de carbono que se detectan en la PDR y las de hidrógeno detectadas en la región HII presentan características distintas consistentes con la región donde se origina cada una: **(i)** La velocidad de las líneas de C es distinta de la velocidad de las líneas de H de la región de HII, pero la velocidad de las líneas de C se corresponde con la velocidad de las líneas moleculares detectadas en esa dirección. **(ii)** Las anchuras de las líneas de C son similares a las de las líneas moleculares y mucho más estrechas que las líneas de la región HII.

En la Fig. 11.1 se puede apreciar la diferencia de anchuras entre la línea de H y la de C, y como la anchura de

esta última se corresponde con la de las demás líneas moleculares de la PDR. La Fig. 11.2 muestra la diferencia en velocidades de las líneas de recombinación. La línea punteada azul marca una velocidad LSR de 10.7 km s^{-1} que es la correspondiente a la de la Barra de Orión. La línea de C aparece centrada a esta velocidad mientras que la de H aparece a un desplazamiento distinto, resultado de la diferencia de velocidades de las regiones en las que se forman las líneas. En las Tablas 11.1 – 11.3 se muestran los parámetros obtenidos a partir de los ajustes Gaussianos de las líneas de recombinación de H, He y C detectadas en el barrido espectral de la Barra de Orión. Los perfiles de las líneas se muestran en la Fig. 11.3.

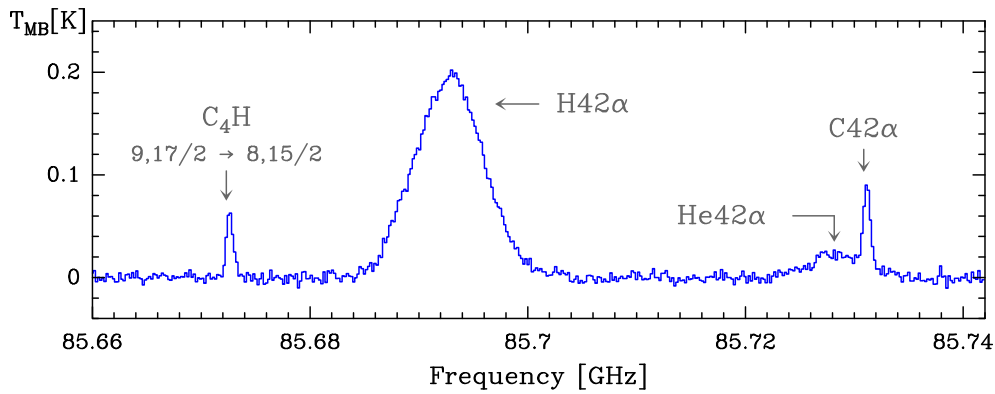


Figura 11.1: Espectro observado entre 85.66 – 85.7 GHz donde se aprecia la diferencia de anchura entre las líneas moleculares y de recombinación de carbono originadas en la PDR y las líneas de recombinación de hidrógeno y helio originadas en la región HII.

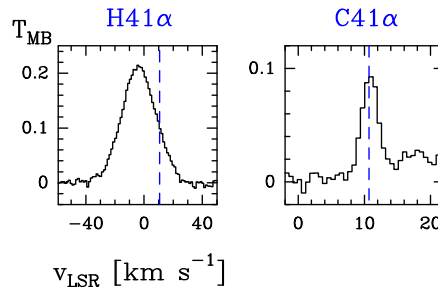


Figura 11.2: Diferencia en velocidades de las líneas de recombinación H41α y C41α.

11.3. Parámetros de línea

Tabla 11.1: Parámetros de línea de las líneas de recombinación de hidrógeno.

Transición	Frecuencia [MHz]	$\int T_{\text{MB}} dv$ [mK km s ⁻¹]	v_{LSR} [km s ⁻¹]	Δv [km s ⁻¹]	T_{MB} [mK]
H42 α	85688.40	5514(55)	-4.7(0.1)	25.6(0.3)	203
H41 α	92034.44	6234(32)	-3.6(0.1)	27.6(0.2)	212
H40 α	99022.96	5013(57)	-4.6(0.1)	25.8(0.3)	182
H39 α	106737.36	4066(28)	-5.5(0.0)	24.7(0.2)	155
H38 α	115274.41	3939(76)	-5.2(0.2)	25.6(0.6)	144
H36 α	135286.04	2971(157)	-6.6(0.6)	24.4(1.4)	114
H35 α	147046.89	3023(58)	-5.4(0.2)	23.5(0.5)	121
H34 α	160211.52	3156(119)	-4.8(0.5)	27.1(1.1)	109
H53 β	83582.47	1738(30)	-4.3(0.2)	25.7(0.5)	64
H52 β	88405.69	1948(26)	-3.4(0.1)	27.5(0.4)	66
H51 β	93607.32	1725(31)	-3.3(0.2)	26.8(0.5)	60
H50 β	99225.21	1401(51)	-3.4(0.4)	23.0(0.9)	57
H49 β	105301.86	1072(23)	-5.4(0.3)	24.6(0.5)	41
H48 β	111885.08	964(30)	-5.8(0.3)	24.5(0.9)	37
H45 β	135249.50	629(90)	-5.4(2.2)	23.0(4.4)	26
H44 β	144474.12	861(45)	-3.9(0.6)	25.8(1.5)	31
H43 β	154557.22	759(66)	-2.4(1.0)	24.0(2.1)	30
H42 β	165601.05	801(135)	-2.4(1.9)	23.7(5.0)	32
H61 γ	80900.32	766(35)	-4.3(0.5)	25.4(1.3)	28
H60 γ	84914.40	845(28)	-3.9(0.4)	25.5(0.9)	31
H59 γ	89198.55	692(47)	-4.0(0.8)	25.5(1.9)	25
H58 γ	93775.88	906(26)	-2.2(0.4)	30.6(1.0)	28
H57 γ	98671.90	658(57)	-4.4(0.9)	21.5(2.0)	29
H56 γ	103914.84	496(23)	-3.4(0.6)	25.7(1.2)	18
H55 γ	109536.01	522(27)	-5.2(0.7)	29.3(1.6)	17
H52 γ	129036.19	415(90)	-9.8(1.9)	18.3(4.6)	21
H51 γ	136559.29	431(74)	-5.7(2.2)	21.6(4.2)	19
H50 γ	144678.94	258(31)	-8.8(1.5)	25.9(3.0)	9
H49 γ	153455.46	154(57)	-9.1(2.5)	14.9(6.7)	10
H48 γ	162956.69	172(63)	-8.7(2.8)	12.2(4.4)	13
H47 γ	173259.01	216(98)	-3.0(2.8)	9.5(4.2)	21
H66 δ	83801.83	410(29)	-5.2(0.7)	21.9(1.7)	18
H65 δ	87615.00	538(14)	-4.1(0.3)	26.9(0.8)	19
H64 δ	91663.14	672(35)	-3.1(0.8)	33.9(1.9)	19

Tabla 11.1: Continuación.

Transición	Frecuencia	$\int T_{\text{MB}} dv$	v_{LSR}	Δv	T_{MB}
	[MHz]	[mK km s ⁻¹]	[km s ⁻¹]	[km s ⁻¹]	[mK]
H63 δ	95964.63	487(47)	-4.6(1.4)	27.9(2.7)	16
H62 δ	100539.63	267(33)	-5.6(1.1)	17.3(2.2)	14
H61 δ	105410.22	269(24)	-5.4(1.0)	23.3(2.5)	11
H60 δ	110600.68	289(24)	-5.9(0.8)	20.8(2.0)	13
H57 δ	128372.26	265(73)	5.6(3.5)	23.2(7.4)	11
H56 δ	135138.16	185(54)	-8.0(1.4)	9.4(3.1)	18
H55 δ	142388.21	161(52)	-3.2(1.8)	15.1(5.9)	10
H54 δ	150166.51	125(36)	-10.2(1.6)	10.9(3.2)	11
H53 δ	158522.09	156(43)	-10.2(2.4)	16.5(4.1)	9
H52 δ	167509.55	64(21)	-11.3(1.1)	5.0(2.3)	12
H71 ϵ	83000.75	305(29)	-4.2(1.0)	23.2(2.4)	12
H70 ϵ	86488.42	339(19)	-5.3(0.6)	24.4(1.5)	13
H68 ϵ	94072.82	456(38)	-4.4(1.2)	29.7(2.8)	14
H67 ϵ	98199.39	166(32)	-4.7(1.5)	15.3(3.3)	10
H66 ϵ	102571.00	231(22)	-5.4(0.9)	18.7(1.8)	12
H65 ϵ	107206.11	152(23)	-4.7(1.1)	16.4(3.2)	9
H64 ϵ	112124.91	106(29)	-8.8(1.6)	14.1(5.9)	7
H61 ϵ	128814.50	90(70)	-4.8(1.3)	4.6(3.4)	18
H60 ϵ	135110.59	175(58)	-10.1(2.0)	12.1(3.8)	14
H59 ϵ	141824.00	141(53)	-6.1(1.6)	8.1(3.2)	16
H58 ϵ	148989.91	40(31)	-3.1(1.3)	6.5(4.2)	6
H57 ϵ	156647.13	77(35)	-11.4(1.7)	7.1(3.6)	10
H56 ϵ	164838.52	65(34)	-4.7(1.1)	12.9(8.9)	5

Tabla 11.2: Parámetros de línea de las líneas de recombinación de helio.

Transición	Frecuencia	$\int T_{\text{MB}} dv$	v_{LSR}	Δv	T_{MB}
	[MHz]	[mK km s ⁻¹]	[km s ⁻¹]	[km s ⁻¹]	[mK]
He42 α	85723.31	521(27)	-7.2(0.5)	20.7(1.1)	24
He41 α	92071.94	503(29)	-6.0(0.5)	19.4(1.2)	24
He39 α	106780.86	97(20)	-5.2(1.3)	12.4(2.8)	7
He51 β	93645.47	124(17)	-3.9(0.7)	10.4(1.2)	11
He49 β	105344.77	124(24)	-4.1(1.6)	17.5(3.9)	7
He48 β	111930.67	84(22)	-5.0(1.9)	11.8(3.4)	7

Tabla 11.3: Parámetros de línea de las líneas de recombinación de carbono.

Transición	Frecuencia [MHz]	$\int T_{\text{MB}} dv$ [mK km s ⁻¹]	v_{LSR} [km s ⁻¹]	Δv [km s ⁻¹]	T_{MB} [mK]
C42 α	85731.14 ^F	319(17)	10.7(0.1)	3.3(0.2)	89
C41 α	92080.35 ^F	323(18)	10.8(0.1)	3.3(0.2)	92
C40 α	99072.36 ^F	261(24)	10.7(0.1)	3.5(0.4)	70
C39 α	106790.61 ^F	167(12)	10.7(0.1)	2.9(0.2)	53
C38 α	115331.91 ^F	163(20)	10.7(0.1)	2.3(0.3)	65
C36 α	135353.53 ^W	267(38)	—	—	—
C35 α	147120.25 ^W	129(65)	—	—	—
C53 β	83624.17 ^F	104(17)	10.8(0.3)	4.2(0.8)	23
C52 β	88449.80 ^F	83(9)	10.8(0.1)	3.1(0.5)	25
C51 β	93654.02 ^F	64(8)	10.7(0.1)	2.4(0.3)	24
C50 β	99274.72 ^F	92(38)	10.7(0.6)	3.9(1.8)	22
C49 β	105354.40 ^F	61(8)	10.7(0.1)	2.6(0.4)	22
C48 β	111940.89 ^F	49(12)	10.6(0.2)	2.1(0.6)	22
C44 β	144546.20 ^W	79(26)	—	—	—
C60 γ	84956.76 ^F	36(8)	10.7(0.1)	1.4(0.4)	23
C59 γ	89243.05 ^F	52(9)	10.7(0.2)	3.1(0.5)	16
C58 γ	93822.66 ^F	26(8)	10.9(0.3)	2.2(0.9)	11
C56 γ	103966.69 ^F	35(8)	10.7(0.5)	3.8(1.1)	8
C55 γ	109590.65 ^F	30(10)	10.7(0.5)	4.0(1.6)	7

Notas. ^F Línea detectada con los FFTS. ^W Línea detectada con WILMA (ver Capítulo 5).

11.4. Perfiles de línea

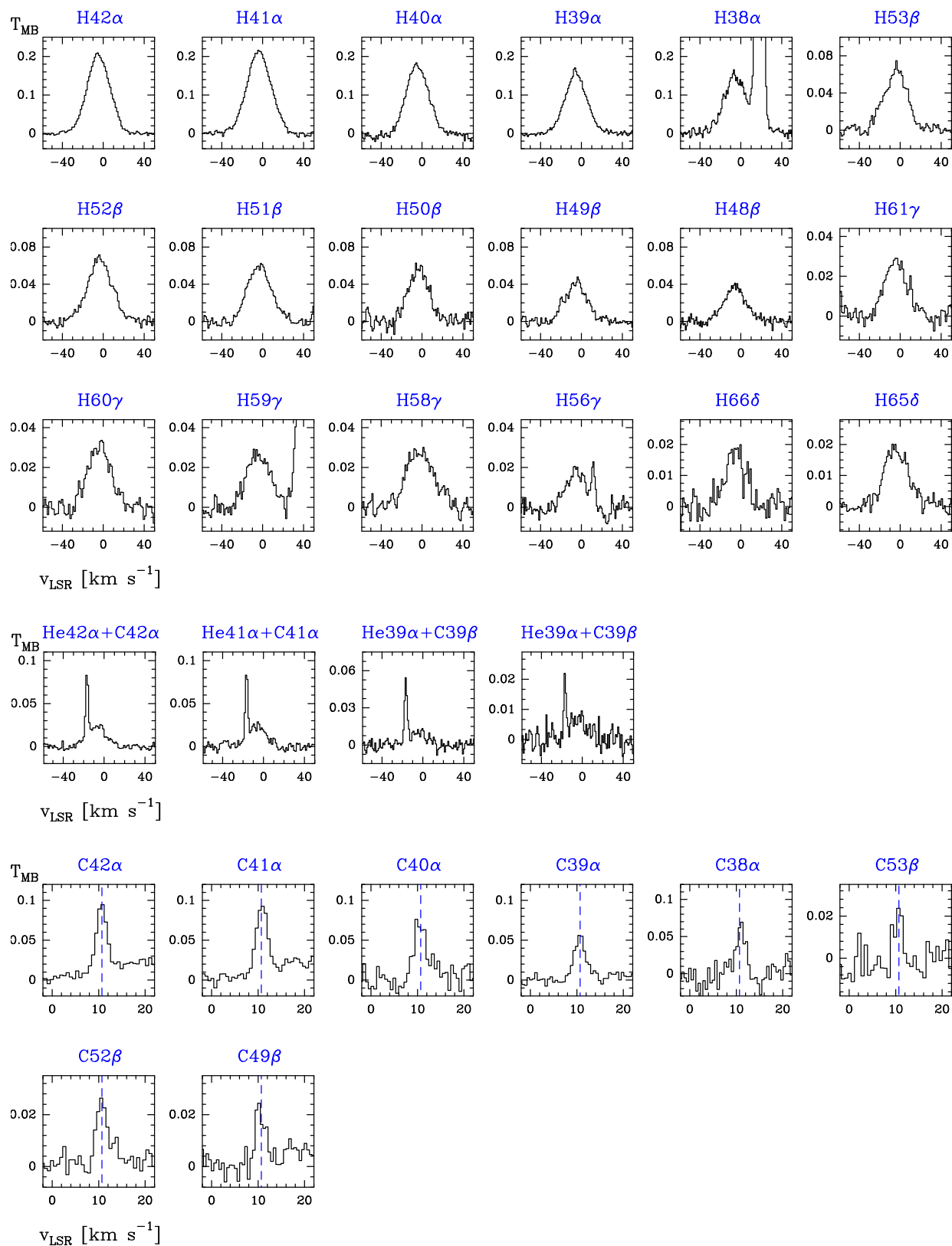


Figura 11.3: Ejemplos de las líneas de recombinación detectadas hacia la posición de observación en la Barra de Orión.

Capítulo 12

Estructura de la Barra de Orión a alta resolución angular

12.1. Observaciones con ALMA

El radiotelescopio ALMA (*Atacama Large Millimeter/submillimeter Array*) es una herramienta fundamental para obtener imágenes espectrales en alta resolución angular de la emisión interestelar y estudiar la cinemática del gas molecular en regiones de formación estelar.

En este Capítulo se presentan las primeras imágenes espectrales en alta resolución espacial (CO y HCO^+) con el interferómetro ALMA de la superficie de la nube molecular de Orión (Goicoechea, Pety, Cuadrado et al. 2016; Nature). ALMA permite resolver la transición del gas atómico al molecular en el borde de la nube, que está directamente expuesta a la radiación UV emitida por las estrellas Trapecio, e investigar la morfología y actividad en la superficie iluminada de la PDR a escalas espaciales muy pequeñas (con una resolución angular de $\lesssim 1''$).

Estas observaciones pertenecen al ciclo 1 de ALMA y han sido realizadas apuntando simultáneamente 27 antenas de 12 m de diámetro a 27 posiciones diferentes de la Barra de Orión creando un mosaico de imágenes que cubre todo el campo de observación. Puesto que un interferómetro no es sensible a la emisión extensa a gran escala, a este conjunto de observaciones interferométricas se le añadió la emisión extensa de la región cartografiada con el radiotelescopio IRAM-30m (*zero- y short-spacings*; ver Fig. 12.1). El campo de visión total de las imágenes combinadas ALMA+IRAM-30m es de $58'' \times 52''$, con una resolución angular algo menor que $1''$ y una resolución espectral en velocidad de 0.4 km s^{-1} . El tiempo total de observación con ALMA fue de $\sim 2 \text{ h}$. Las observaciones se realizaron en la banda 7 a 345.79 GHz (CO $J = 3 \rightarrow 2$) y 356.734 GHz (HCO^+ $J = 4 \rightarrow 3$).

12.2. Resultados

Las imágenes obtenidas por ALMA revelan que las zonas de transición H/H_2 y $\text{C}^+/\text{C}/\text{CO}$ están mucho más próximas entre sí que las predicciones de los modelos de PDR estacionarios que han estado vigentes en las últimas décadas. ALMA resuelve el borde de la PDR donde se observa una intensa emisión de HCO^+ y CO. La emisión

de estas especies coincide espacialmente con los máximos de emisión del hidrógeno molecular vibracionalmente excitado (H_2^*) que traza la transición H/H_2 . Sin embargo, los modelos estacionarios de una PDR con densidad $n_{\text{H}} = (4 - 5) \times 10^4 \text{ cm}^{-3}$ predicen que la transición C^+/CO ocurre a mayor profundidad dentro de la nube mo-

lecular debido a que el carbono tiene un potencial de ionización (11.3 eV) menor que el del hidrógeno (13.6 eV), y a que el CO no se puede auto-apatallar de la fotodisociación tan eficazmente como el H_2 . La coincidencia espacial de varios máximos de emisión del H_2^+ y HCO^+ muestra que la formación de moléculas que contienen carbono comienza en la superficie de la nube (iniciada por las reacciones de C^+ con H_2). Por lo tanto, la transición C^+/CO se produce más cerca del frente de ionización de lo que predicen los modelos.

ALMA resuelve tres máximos periódicos de emisión intensa de HCO^+ (subestructuras filamentosarias y pequeños glóbulos de ~ 1000 AU) en el entorno del frente de disociación y aproximadamente paralelos a él. Las condiciones físicas que reproducen la emisión de CO y HCO^+ hacia el frente de disociación (en $\delta x \simeq 15''$) son $T \simeq 200 - 300$ K y $n_{\text{H}} \sim (0.5 - 1.5) \times 10^6 \text{ cm}^{-3}$. Estas subestructuras están rodeadas por una componente de gas de menor densidad (gas ambiente), con $n_{\text{H}} \simeq (0.5 - 1.0) \times 10^5 \text{ cm}^{-3}$, que producen una emisión extensa. Las subestructuras de HCO^+ (con unas dimensiones típicas de $\sim 2'' \simeq 4 \times 10^{-3}$ pc) están situadas en el borde de la nube molecular y son diferentes a las condensaciones más grandes (*clumps* de tamaño $\sim 5'' - 10''$) que se observan a mayor profundidad dentro de la nube molecular (e.g. Lis & Schilke 2003, Young Owl et al. 2000). Por lo tanto, las subestructuras densas tienen factores de compresión de $\sim 5 - 30$ con respecto a la componente de gas ambiente y son sometidas a altas presiones térmicas ($P/k = n_{\text{H}}T \simeq 2 \times 10^8 \text{ K cm}^{-3}$). Los tres má-

ximos periódicos de HCO^+ sugieren que existe una onda de compresión de alta presión, que se mueve hacia la nube molecular, demostrando que los efectos dinámicos y de no equilibrio son importantes para la evolución de la nube. Los diversos máximos de emisión de CO a lo largo de la superficie de la nube molecular (ondulaciones separadas por menos de $\sim 5'' \simeq 0.01$ pc), indican la presencia de inestabilidades en el frente de disociación.

Se observa también una emisión débil de HCO^+ y CO en la capa atómica, a $\delta x < 15''$. Las estructuras densas de HCO^+ podrían haber sobrevivido al paso del frente de disociación, mientras que las estructuras de CO en la capa atómica pueden estar trazando una componente de CO más caliente que se vuelve a formar *in situ* en la capa atómica o el gas molecular que se fotoevapora de la superficie de la nube molecular. En este último caso, el flujo de CO hacia la capa atómica estaría favorecido por la diferencia de presión entre las capas moleculares comprimidas y la capa atómica de menor densidad.

Dentro del contexto de los mecanismos capaces de inducir y regular la formación de estrellas, las subestructuras de alta densidad formadas por la compresión del gas en el borde iluminado de la nube podrían dar lugar a condensaciones masivas que evolucionen a la formación de una nueva generación de estrellas en un futuro. Aunque de momento, la masa de estas estructuras y su distribución en densidades no son suficientes para que la gravedad impulse su colapso.

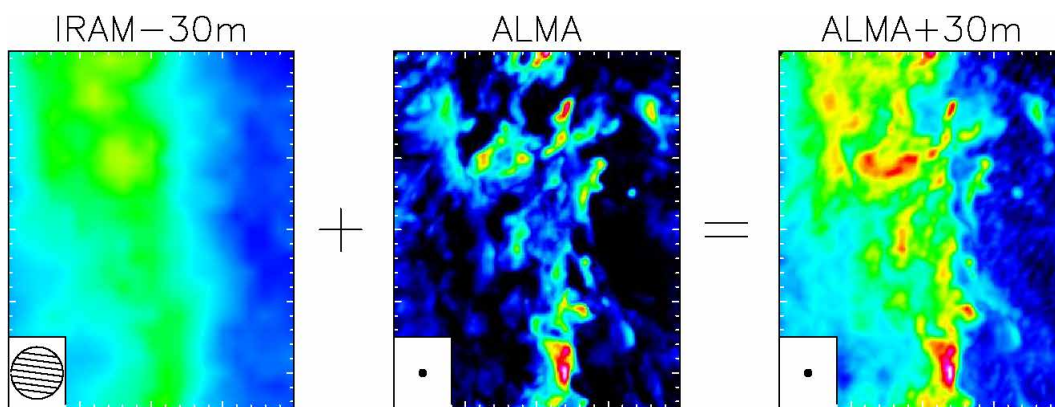


Figura 12.1: Combinación de las imágenes de HCO^+ obtenidas con el interferómetro ALMA con la emisión extensa cartografiada con el radiotelescopio IRAM-30m.

12.3. Goicoechea, Pety, Cuadrado et al. 2016 (Nature)

LETTER

doi:10.1038/nature18957

Compression and ablation of the photo-irradiated molecular cloud the Orion Bar

Javier R. Goicoechea¹, Jérôme Pety^{2,3}, Sara Cuadrado¹, José Cernicharo¹, Edwige Chapillon^{2,4,5}, Asunción Fuente⁶, Maryvonne Gerin^{3,7}, Christine Joblin^{8,9}, Nuria Marcelino¹ & Paolo Pilleri^{8,9}

The Orion Bar is the archetypal edge-on molecular cloud surface illuminated by strong ultraviolet radiation from nearby massive stars. Our relative closeness to the Orion nebula (about 1,350 light years away from Earth) means that we can study the effects of stellar feedback on the parental cloud in detail. Visible-light observations of the Orion Bar¹ show that the transition between the hot ionized gas and the warm neutral atomic gas (the ionization front) is spatially well separated from the transition between atomic and molecular gas (the dissociation front), by about 15 arcseconds or 6,200 astronomical units (one astronomical unit is the Earth–Sun distance). Static equilibrium models^{2,3} used to interpret previous far-infrared and radio observations of the neutral gas in the Orion Bar^{4–6} (typically at 10–20 arcsecond resolution) predict an inhomogeneous cloud structure comprised of dense clumps embedded in a lower-density extended gas component. Here we report one-arcsecond-resolution millimetre-wave images that allow us to resolve the molecular cloud surface. In contrast to stationary model predictions^{7–9}, there is no appreciable offset between the peak of the H₂ vibrational emission (delineating the H/H₂ transition) and the edge of the observed CO and HCO⁺ emission. This implies that the H/H₂ and C⁺/C/CO transition zones are very close. We find a fragmented ridge of high-density substructures, photoablative gas flows and instabilities at the molecular cloud surface. The results suggest that the cloud edge has been compressed by a high-pressure wave that is moving into the molecular cloud, demonstrating that dynamical and non-equilibrium effects are important for the cloud evolution.

The Atacama Large Millimeter/submillimeter Array (ALMA) radio-telescope allows us to resolve the transition from atomic to molecular

gases at the edge of the Orion molecular cloud^{10–13}, which is directly exposed to energetic radiation from the Trapezium stars (Fig. 1). The strong ultraviolet field drives a blister ‘H II region’ (hot ionized hydrogen gas or H⁺) that is eating its way into the parental molecular cloud. At the same time, flows of ionized gas stream away from the cloud surface at about 10 km s^{−1} (roughly the speed of sound $c_{\text{H II}}$ at $T \approx 10^4$ K)^{10,11}. The so-called photon-dominated or photodissociation region (PDR¹⁴; see Extended Data Fig. 1) starts at the H II region/cloud boundary where only far-ultraviolet radiation penetrates the ‘neutral’ cloud, that is, stellar photons with energies below 13.6 eV that cannot ionize H atoms but do dissociate molecules ($\text{H}_2 + \text{photon} \rightarrow \text{H} + \text{H}$), and ionize elements such as carbon ($\text{C} + \text{photon} \rightarrow \text{C}^+ + \text{electron}$). Inside the PDR, the far-ultraviolet photon flux gradually decreases due to dust grain extinction and H₂ line absorption, as do the gas and dust temperatures¹⁴. These gradients produce a layered structure with different chemical compositions as one moves from the cloud edge to the interior^{5,13}. The ionized nebula (the H II region) can be traced by the visible light emission from atomic ions (such as the [S II] 6,731 Å electronic line). The ionization front is delineated by the [O I] 6,300 Å line of neutral atomic oxygen¹⁵ (Fig. 1). Both transitions are excited by high-temperature collisions with electrons. Therefore, their intensities sharply decline as the electron abundance decreases by a factor of about 10⁴ at the H⁺/H transition layer. In Fig. 1b, the dark cavity between the ionization front and the HCO⁺-emitting zone is the neutral ‘atomic layer’ ($x(\text{H}) > x(\text{H}_2) \gg x(\text{H}^+)$, where x is the species abundance with respect to H nuclei). This layer is very bright in mid-infrared polycyclic aromatic hydrocarbon emission, and cools via the far-infrared O and C⁺ emission lines¹⁴. Although most of

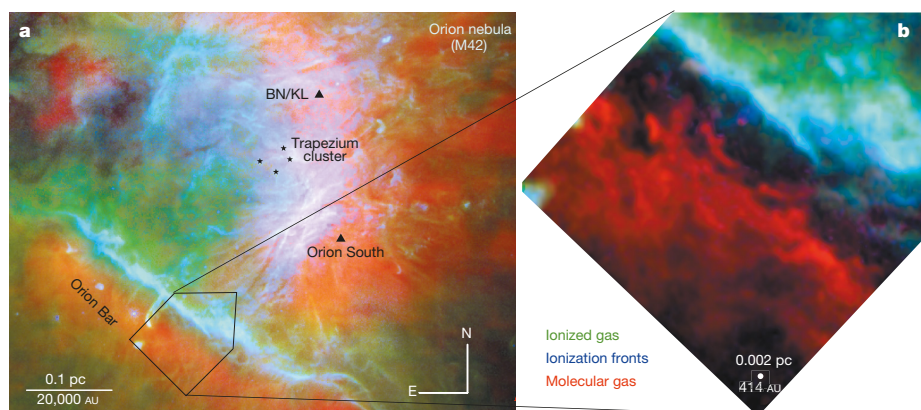
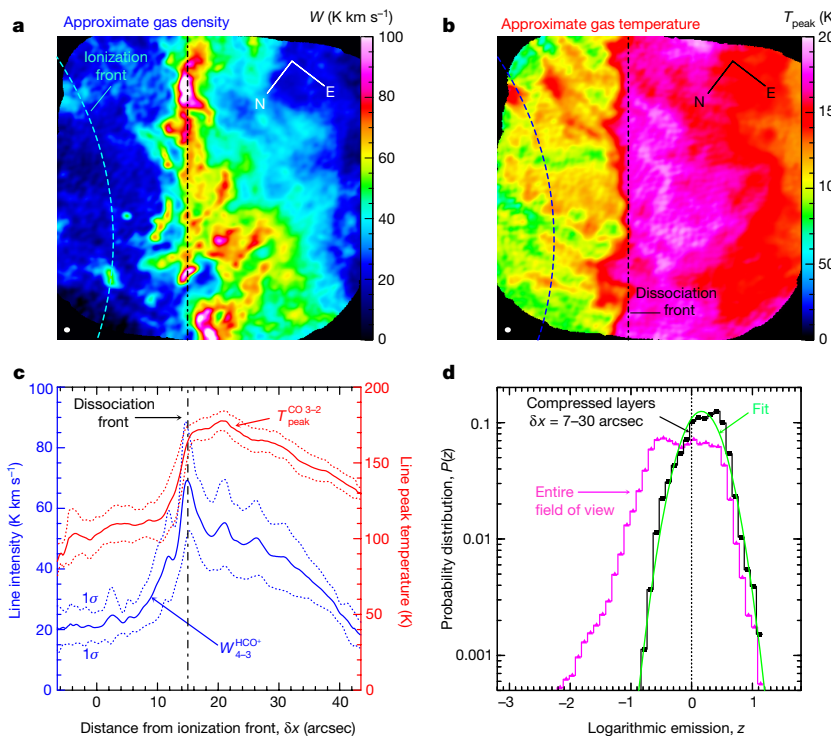


Figure 1 | Multiphase view of the Orion nebula and molecular cloud. **a**, Overlay of the HCO⁺ $J=3-2$ emission (red) tracing the extended Orion molecular cloud. The hot ionized gas surrounding the Trapezium stars is shown by the [S II] 6,731 Å emission (green). The interfaces between the ionized and the neutral gas, the ionization fronts, are traced by the [O I] 6,300 Å emission (blue). Both lines were imaged with VLT/MUSE¹⁵. The size of the image is approximately $5.8' \times 4.6'$. BN/KL, Becklin–Neugebauer/Kleinmann–Low star-forming region. **b**, Close-up of the Orion Bar region imaged with ALMA in the HCO⁺ $J=4-3$ emission (red). The black region is the atomic layer.

¹Grupo de Astrofísica Molecular, Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid (CSIC), Calle Sor Juana Inés de la Cruz 3, E-28049 Cantoblanco, Madrid, Spain. ²Institut de Radioastronomie Millimétrique (IRAM), 300 rue de la Piscine, F-38406 Saint Martin d'Hères, France. ³Laboratoire d'Etudes du Rayonnement et de la Matière en Astrophysique et Atmosphères (LERMA), Observatoire de Paris, Centre National de la Recherche Scientifique (CNRS), Unité Mixte de Recherche (UMR) 8112, École Normale Supérieure, PSL Research University, 24 rue Lhomond, 75231, Paris Cedex 05, France. ⁴Laboratoire d'Astrophysique de Bordeaux (LAB), Université de Bordeaux, UMR 5804, F-33270 Floirac, France. ⁵CNRS, LAB, UMR 5804, F-33270 Floirac, France. ⁶Observatorio Astronómico Nacional (OAN-IGN), Apartado 112, 28803 Alcalá de Henares, Spain. ⁷Sorbonne Universités, Université Pierre et Marie Curie (UPMC), Université Paris 06, 75000, France. ⁸Université de Toulouse, Université Paul-Sabatier-Observatoire Midi-Pyrénées (UPS-OMP), Institut de Recherche en Astrophysique et Planétologie (IRAP), 31028, Toulouse, France. ⁹CNRS, IRAP, 9 Avenue du Colonel Roche, BP 44346, 31028 Toulouse, France.

RESEARCH LETTER

**Figure 2 | ALMA images of the Orion Bar.**

a, Integrated intensity of the $\text{HCO}^+ J=4-3$ line. **b**, $\text{CO } J=3-2$ line peak. Compared with Fig. 1, **a** and **b** have been rotated 127.5° anticlockwise to bring the incident ultraviolet radiation from the left (see Extended Data Fig. 1). The dashed curves and the vertical dot-dashed lines delineate the ionization and dissociation fronts, respectively¹. **c**, Vertically averaged intensity cuts perpendicular to the Orion Bar in W_{HCO^+} (blue curve) and $T_{\text{peak}}^{\text{CO } 3-2}$ (red curve). **d**, Probability distribution of W_{HCO^+} (proportional to the gas density) in the observed field (magenta triangles) and in the compressed layers (black squares).

the electrons are provided by the ionization of C atoms (thus $x(e^-) \approx x(\text{C}^+) \approx 10^{-4}$)^{14,16}, the gas is mainly heated by collisions with energetic (about 1 eV) electrons photo-ejected from small grains and polycyclic aromatic hydrocarbons^{2,14}. For the strong far-ultraviolet radiation flux impinging the Orion Bar^{3,5}, which is approximately 4.4×10^4 times the average flux in a local diffuse interstellar cloud¹⁶, a gas density $n_{\text{H}} = n(\text{H}) + 2n(\text{H}_2)$ of $(4-5) \times 10^4 \text{ cm}^{-3}$ in the atomic layer is consistent with the observed separation between the ionization and dissociation fronts^{3,4}.

ALMA resolves the sharp edge where the HCO^+ and CO emission becomes intense (Fig. 2). These layers spatially coincide with the brightest peaks of H_2 vibrational emission (H_2^+) tracing the H/H_2 transition (Extended Data Fig. 2). Therefore, the H/H_2 and the C^+/CO transition zones occur very close to each other. Static equilibrium models of a PDR with $n_{\text{H}} = (4-5) \times 10^4 \text{ cm}^{-3}$ predict^{4,9,14}, however, that the C^+/CO transition should occur deeper inside the molecular cloud because of the lower ionization potential of C atoms (11.3 eV) and because CO may not self-shield from photodissociation as effectively as H_2 . The spatial coincidence of several H_2^+ and HCO^+ emission peaks shows that the formation of carbon molecules starts at the surface of the cloud (initiated by reactions of C^+ with H_2). This shifts the C^+/CO transition closer to the ionization front and suggests that dynamical effects are important^{17,18}.

To zero order, the $\text{CO } J=3-2$ (where J is the rotational quantum number) line intensity peak ($T_{\text{peak}}^{\text{CO } 3-2}$ in K) is a measure of the gas temperature T in the molecular cloud ($\delta x > 15''$ in Fig. 2c, where δx is the distance to the ionization front). The $\text{HCO}^+ J=4-3$ integrated line intensity (W_{HCO^+} in K km s^{-1}), however, scales with the gas density n_{H} (see Methods and Extended Data Fig. 3). Although the $T_{\text{peak}}^{\text{CO } 3-2}$ image shows a relatively homogeneous temperature distribution, the W_{HCO^+} image shows small-scale structure (Fig. 2a, b). In particular, ALMA resolves several bright HCO^+ emission peaks (filamentary substructures, some akin to globulettes) surrounding the dissociation front and roughly parallel to it. These substructures are surrounded by a lower-density gas component, with $n_{\text{H}} \approx (0.5-1.0) \times 10^5 \text{ cm}^{-3}$, producing an extended (ambient) emission^{4,5}. The HCO^+ substructures

(with a typical width of about $2'' \approx 4 \times 10^{-3} \text{ pc}$) are located at the molecular cloud edge, and are different to the bigger ($5''-10''$) condensations previously seen deeper inside the molecular cloud^{6,19}.

To investigate the stratification of molecular emission inside the cloud, we constructed averaged emission cuts perpendicular to the Orion Bar. Three emission maxima are resolved in the W_{HCO^+} crosscuts at roughly periodic separations of about $5''$ (approximately 0.01 pc; Fig. 2c). Excitation models show that the average physical conditions that reproduce the mean CO and HCO^+ intensities towards the dissociation front (at $\delta x \approx 15''$) are $T \approx 200-300 \text{ K}$ and $n_{\text{H}} \approx (0.5-1.5) \times 10^6 \text{ cm}^{-3}$ (see Methods and Extended Data Fig. 3). Hence, the over-dense substructures have compression factors of about 5–30 with respect to the ambient gas component and are submitted to high thermal pressures ($P/k = n_{\text{H}} T \approx 2 \times 10^8 \text{ K cm}^{-3}$). The three periodic maxima suggest that a high-pressure compression wave exists, and is moving into the molecular cloud. This wave may be associated with an enhanced magnetic field (several hundred microgauss; see Methods).

In the very early stages of an expansion of the H II region into molecular clouds, theory predicts that the ionization and dissociation fronts are co-spatial (an R -type front^{15,20}). Soon after ($t < 1,000 \text{ yr}$), the expansion slows down and the dissociation front propagates ahead of the ionization front and into the molecular cloud^{16,17}. The ionization front changes to a D -type front (a compressive wave travels ahead of the ionization front^{16,20} and the neutral gas becomes denser than the ionized gas). For a front advancing at a speed^{17,18} of $0.5-1.0 \text{ km s}^{-1}$, the observed separation between the ionization and dissociation fronts in the Orion Bar implies a crossing time of 25,000–50,000 yr. Later in the expansion phase, when t is several times greater than the dynamical time t_{dyn} of the expanding H II region (the ratio of the initial radius of the H II region, the so-called the Strömgen radius, and $c_{\text{H II}}$), the compressive wave slowly enters into the molecular cloud^{21,22} ($t_{\text{dyn}} \approx 0.2 \text{ pc per } 10 \text{ km s}^{-1} \approx 20,000 \text{ yr}$ for the Orion Bar). Observational evidence of such dynamical effects is scarce.

In the compressed layers suggested by ALMA (where δx is between $7''$ and $30''$ in Fig. 2a), the distribution of the gas densities follows a relatively narrow log-normal distribution (Fig. 2d). This is consistent

with magnetohydrodynamic simulations of non-gravitating turbulent clouds^{23,24}. When the entire observed field is analysed, the shape of the distribution is closer to a double-peaked log-normal distribution. This resembles specific simulations in which the cloud compression is induced by the expansion of the ionized gas^{24,25} (and not by a strong turbulence). Searching for further support for this scenario, we investigated the degree of turbulence and compared the different contributions of the gas pressure in the PDR (Extended Data Table 1). The inferred non-thermal (turbulent) velocity dispersion, about 1 km s^{-1} , results in a moderate Mach number of ≤ 1 (the ratio of the turbulent velocity dispersion to the local speed of sound)—that is, only a gentle level of turbulence. The thermal pressure exerted by the H II region at the H⁺/H interface¹ is several times higher than the turbulent and thermal pressures in the ambient molecular cloud. These pressure differences, together with the detection of over-dense substructures close to the cloud edge, agree with the ultraviolet radiation-driven compression scenario^{25,26}. Whether these substructures could be the seeds of future star-forming clumps (for example, by merging into massive clumps) is uncertain^{22,27}. Gravitational collapse is not apparent from their density distribution (no high-density power-law tail^{24,25}). Indeed, their estimated masses (less than about $0.005 M_{\odot}$; where M_{\odot} is the mass of the Sun) are much lower than the mass needed to make them gravitationally unstable. Even so, the increased ultraviolet shielding produced by the ridge of high-density substructures probably contributes to protecting the molecular cloud from photodestruction for longer periods.

The ALMA images also show CO emission ripples²⁸ along the surface of the molecular cloud (undulations separated by less than about $5'' \approx 0.01 \text{ pc}$ in Fig. 2b), which are indicative of instabilities at the dissociation front. Such small-scale corrugations resemble the ‘thin-shell’ instability produced by the force imbalance between thermal (isotropic) and ram (parallel to the flow) pressures²⁹. Characterizing these interface instabilities in detail would require new magnetohydrodynamic models that include mesh-resolutions that are well below the $0.1\text{--}0.01 \text{ pc}$ scales achieved in current simulations²⁵ and include neutral gas thermochemistry.

Finally, ALMA reveals fainter HCO⁺ and CO emission in the atomic layer (HCO⁺ globulettes and plume-like CO features at $\delta x < 15''$, Fig. 2a, b). The dense gas HCO⁺ emission structures must have survived the passage of the dissociation front³⁰, whereas the CO plumes may trace either warm CO that reforms *in situ* in the atomic layer or molecular gas that advects or photoablates²⁸ from the surface of the molecular cloud. In the latter case, the pressure difference between the compressed molecular layers and the lower-density atomic layer would favour such a flow. Interestingly, molecular line profiles from the plumes typically show two velocity components, one of them identical to that of gas from inside the Orion Bar (Extended Data Fig. 4). This kinematic association supports the presence of photoablative flows through the atomic layer, and generally agrees with the suggested role of dynamical and non-equilibrium effects in ultraviolet-irradiated clouds.

Online Content Methods, along with any additional Extended Data display items and Source Data, are available in the online version of the paper; references unique to these sections appear only in the online paper.

Received 13 February; accepted 8 June 2016.

Published online 10 August 2016.

1. Walmsley, C. M., Natta, A., Oliva, E. & Testi, L. The structure of the Orion Bar. *Astron. Astrophys.* **364**, 301–317 (2000).
2. Tielens, A. G. G. M. & Hollenbach, D. J. Photodissociation regions. I: basic model. *Astrophys. J.* **291**, 722–754 (1985).
3. Andree-Labsch, S., Ossenkopf, V. & Röllig, M. 3D modelling of clumpy PDRs: understanding the Orion Bar stratification. Preprint at <http://arxiv.org/abs/1405.5553> (2014).
4. Tielens, A. G. G. M. *et al.* Anatomy of the photodissociation region in the Orion Bar. *Science* **262**, 86–89 (1993).
5. Hogerheijde, M. R., Jansen, D. J. & van Dishoeck, E. F. Millimeter and submillimeter observations of the Orion Bar. 1: physical structure. *Astron. Astrophys.* **294**, 792–810 (1995).

6. Young Owl, R. C., Meixner, M. M., Wolfire, M., Tielens, A. G. G. M. & Tauber, J. HCN and HCO⁺ images of the Orion Bar photodissociation region. *Astrophys. J.* **540**, 886–906 (2000).
7. Sternberg, A. & Dalgarno, A. Chemistry in dense photon-dominated regions. *Astrophys. J. Suppl. Ser.* **99**, 565–607 (1995).
8. Le Petit, F., Nehmé, C., Le Bourlot, J. & Roueff, E. A model for atomic and molecular interstellar gas: The Meudon PDR code. *Astrophys. J. Suppl. Ser.* **164**, 506–529 (2006).
9. Röllig, M. *et al.* A photon dominated region code comparison study. *Astron. Astrophys.* **467**, 187–206 (2007).
10. Genzel, R. & Stutzki, J. The Orion molecular cloud and star-forming region. *Annu. Rev. Astron. Astrophys.* **27**, 41–85 (1989).
11. Goicoechea, J. R. *et al.* Velocity-resolved [CII] emission and [CII]/FIR mapping along Orion with Herschel. *Astrophys. J.* **812**, 75 (2015).
12. O'Dell, C. R. The Orion Nebula and its associated population. *Annu. Rev. Astron. Astrophys.* **39**, 99–136 (2001).
13. van der Werf, P. P., Goss, W. M. & O'Dell, C. R. Tearing the veil: interaction of the Orion Nebula with its neutral environment. *Astrophys. J.* **762**, 101 (2013).
14. Hollenbach, D. J. & Tielens, A. G. G. M. Photodissociation regions in the interstellar medium of galaxies. *Rev. Mod. Phys.* **71**, 173–230 (1999).
15. Weilbacher, P. M. *et al.* A MUSE map of the central Orion Nebula (M 42). *Astron. Astrophys.* **582**, A114 (2015).
16. Draine, B. T. *Physics of the Interstellar and Intergalactic Medium* (Princeton Univ. Press, 2011).
17. Bertoldi, F. & Draine, B. T. Nonequilibrium photodissociation regions: ionization-dissociation fronts. *Astrophys. J.* **458**, 222–232 (1996).
18. Störzer, H. & Hollenbach, D. J. Nonequilibrium photodissociation regions with advancing ionization fronts. *Astrophys. J.* **495**, 853–870 (1998).
19. Lis, D. C. & Schilke, P. Dense molecular clumps in the Orion Bar photon-dominated region. *Astrophys. J.* **597**, L145–L148 (2003).
20. Spitzer, L. *Physical Processes in the Interstellar Medium* (Wiley, 1978).
21. Hill, J. K. & Hollenbach, D. J. Effects of expanding compact H II regions upon molecular clouds: molecular dissociation waves, shock waves, and carbon ionization. *Astrophys. J.* **225**, 390–404 (1978).
22. Hosokawa, T. & Inutsuka, S.-i. Dynamical expansion of ionization and dissociation front around a massive star. II: on the generality of triggered star formation. *Astrophys. J.* **646**, 240–257 (2006).
23. Hennebelle, P. & Falgarone, E. Turbulent molecular clouds. *Astron. Astrophys. Rev.* **20**, 55 (2012).
24. Federrath, C. & Klessen, R. S. On the star formation efficiency of turbulent magnetized clouds. *Astrophys. J.* **763**, 51 (2013).
25. Tremblin, P., Audit, E., Minier, V., Schmidt, W. & Schneider, N. Three-dimensional simulations of globule and pillar formation around H II regions: turbulence and shock curvature. *Astron. Astrophys.* **546**, A33 (2012).
26. Gorti, U. & Hollenbach, D. J. Photoevaporation of clumps in photodissociation regions. *Astrophys. J.* **573**, 215–237 (2002).
27. Elmegreen, B. G. & Lada, C. J. Sequential formation of subgroups in OB associations. *Astrophys. J.* **214**, 725–741 (1977).
28. Berné, O., Marcelino, N. & Cernicharo, J. Waves on the surface of the Orion molecular cloud. *Nature* **466**, 947–949 (2010).
29. García-Segura, G. & Franco, J. From ultracompact to extended H II regions. *Astrophys. J.* **469**, 171–188 (1996).
30. Lefloch, B. & Lazareff, B. Cometary globules. 1: formation, evolution and morphology. *Astron. Astrophys.* **289**, 559–578 (1994).

Acknowledgements We thank the ERC for support under grant ERC-2013-Syg-610256-NANOCOSMOS. We also thank MINECO, Spain, for funding support under grants CSD2009-00038 and AY2012-32032. This work was in part supported by the French CNRS programme ‘Physique et Chimie du Milieu Interstellaire’. We thank P. Schilke and D. Lis for sharing their IRAM-PdBI observations of the H¹³CN J=1–0 condensations inside the Orion Bar, and M. Walmsley for sharing his H₂ v=1–0 S(1) and O 1.3 μm infrared images. ALMA is a partnership of the ESO (representing its member states), the NSF (USA) and NINS (Japan), together with the NRC (Canada), the NSC and ASIAA (Taiwan) and KASI (Republic of Korea) in cooperation with the Republic of Chile. The Joint ALMA Observatory is operated by the ESO, the AUI/NRAO and the NAJO. This Letter makes use of observations obtained with the IRAM 30 m telescope. IRAM is supported by the INSU/CNRS (France), the MPG (Germany), and the IGN (Spain).

Author Contributions J.R.G. was the principal investigator of the ALMA project. He led the scientific analysis, modelling and wrote the manuscript. J.P. and E.C. carried out the ALMA data calibration and data reduction. S.C. and N.M. carried out the single-dish maps observations with the IRAM 30 m telescope. All authors participated in the discussion of results, determination of the conclusions and revision of the manuscript.

Author Information We used the ALMA data ADS/JAO.ALMA#2012.1.00352.S available at https://almascience.eso.org/aq/?project_code=2012.1.00352.S. Reprints and permissions information is available at www.nature.com/reprints. The authors declare no competing financial interests. Readers are welcome to comment on the online version of the paper. Correspondence and requests for materials should be addressed to J.R.G. (jrgoicoechea@icmm.csic.es).

Reviewer Information Nature thanks R. Plume and the other anonymous reviewer(s) for their contribution to the peer review of this work.

RESEARCH LETTER

METHODS

ALMA interferometric and IRAM 30-m single-dish observations. ALMA Cycle-1 observations of the Orion Bar were carried out using 27 12 m antennae in band 7 at 345.796 GHz (CO $J=3-2$) and 356.734 GHz (HCO⁺ $J=4-3$). The observations consisted of a 27-pointing (the array points to 27 different positions to cover the field) mosaic centred at right ascension $\alpha(2000) = 5\text{ h }35\text{ min }20.6\text{ s}$; declination $\delta(2000) = -05^\circ 25' 20''$. The total field-of-view is $58'' \times 52''$. Baseline configurations from about 12 m to about 444 m were used (C32-3 antennae configuration). Lines were observed with correlators providing a resolution of approximately 500 kHz ($\delta\nu \approx 0.4\text{ km s}^{-1}$) over a 937.5 MHz bandwidth. The total observation time on the ALMA 12 m array was around 2 h. ALMA executing blocks were first calibrated in the CASA software (version 4.2.0) and then exported to GILDAS. To recover the large-scale extended emission filtered out by the interferometer, we used fully sampled single-dish maps as ‘zero-’ and ‘short-spacings’. Maps were obtained with the IRAM 30 m telescope (Pico Veleta, Spain) using the EMIR330 receiver under excellent winter conditions ($<1\text{ mm}$ of precipitable water vapour). On-the-fly scans of a $170'' \times 170''$ region were obtained both along and perpendicular to the Orion Bar. The beam full-width at half-maximum power (FWHM) at 350 GHz is about $7''$. The GILDAS/MAPPING software was used to create the short-spacing visibilities³¹ not sampled by ALMA. These visibilities were merged with the interferometric observations. Each mosaic field was imaged and a dirty mosaic was built. The dirty image was deconvolved using the standard Högbom CLEAN algorithm and the resulting cubes were scaled from Jansky per beam to a brightness temperature scale using the synthesized beam size of about $1''$. This resolution is a factor of approximately 9 higher than previous interferometric observations of the HCO⁺ $J=1-0$ line towards the Orion Bar⁶. The achieved root mean squared noise is about 0.4 K per 0.4 km s^{-1} channel, with an absolute flux accuracy of about 10%. The resulting images are shown in Figs 1b and 2 and in Extended Data Fig. 2. Finally, the large-scale HCO⁺ $J=3-2$ (267.558 GHz) on-the-fly map shown in Fig. 1a was taken with the multi-beam receiver HERA, also at the IRAM 30 m telescope. The spectral and angular resolutions are approximately 0.4 km s^{-1} and $9''$ (FWHM) respectively. The final images were generated using the GILDAS/GREG software.

Saturation and extinction corrections for the near-infrared image. To better understand the spatial distribution of the H₂ $v=1-0$ S(1) line emission at $\lambda = 2.12\mu\text{m}$ (H₂^{*}) presented in ref. 1 and shown in Extended Data Fig. 2, we note two effects that determine the resulting emission morphology. First, there is a bright star in the line of sight towards the Orion Bar ($\Theta^2\text{A Ori}$ at $\alpha(2000) = 5\text{ h }35\text{ m }22.9\text{ s}$; $\delta(2000) = -05^\circ 24' 57.8''$) that saturates the near-infrared detectors in a slit of width approximately $4''$ parallel to the Orion Bar (roughly between $\delta x = 19''$ and $23''$ in our rotated images). Hence, no H₂^{*} data are shown in this range. Therefore, the layers with H₂ vibrational emission are wider than suggested by Extended Data Fig. 2, and more H₂^{*} emission peaks may coincide with HCO⁺ peaks in the blanked $\delta x = 19''-23''$ region. Older, near-infrared images with lower angular and spectral resolutions do show³² that the H₂^{*} emission extends out to $\delta x \approx 20''$. Second, dust extinction (due to foreground dust in Orion’s Veil and also due to dust in the Orion Bar itself) may affect the apparent morphology of the near-infrared images. Such effects are often neglected^{1,32,33} and are not included in Extended Data Fig. 2. The extinction towards the Orion Bar produced by the Veil is not greater than about 2 mag (ref. 34). Adopting a dust reddening appropriate to Orion^{11,35}, $R_V = A_V/E(B-V) = 5.5$, and the A_K/A_V (where B and V stand for the blue and visible photometric filters at 4,400 and 5,500 Å respectively, A_V and A_K are the extinctions in the visible and in the K filter at $2.2\mu\text{m}$, $E(B-V) = A_B - A_V$ is the reddening factor, and R_V is a dimensionless parameter that characterizes the slope of the extinction curve) value in ref. 35, we estimate that the H₂^{*} emission lines would only be approximately 30% brighter if foreground extinction corrections are taken into account. An additional magnitude of extinction due to dust in the atomic layer of the Bar itself results in a line intensity increase of about 50%. Therefore, minor morphological differences between the near-infrared and millimetre-wave images could reflect a small-scale or patchy extinction differences in the region¹.

Excitation and radiative transfer models for CO and HCO⁺. To estimate the physical conditions of the HCO⁺-emitting gas near the dissociation front we run a grid of nonlocal, non-local thermodynamic equilibrium excitation and radiative transfer (Monte Carlo) models. This approach allows us to explore different column densities, gas temperatures and densities. Compared with most PDR models (using local escape probability approximations) our models take radiative pumping, line trapping and opacity broadening into account. This allows for the treatment of optically thick lines (see the appendix in ref. 36 for code details and benchmarking tests). Our models use the most recent inelastic collisional rates of HCO⁺ with H₂ and with electrons, and of CO with both H₂ and H. The electron density, n_e , is an important factor in the collisional excitation of molecular cations in a far-ultraviolet-illuminated gas. For HCO⁺, collisions with electrons start to

contribute above $n_e > 10\text{ cm}^{-3}$ (or $n_H > 10^5\text{ cm}^{-3}$ if most of the electrons are provided by carbon atom ionization). In PDRs, collisions of molecules with H atoms can also contribute because the molecular gas fraction, $f = 2n(\text{H}_2)/n_H = 2n(\text{H}_2)/[n(\text{H}) + 2n(\text{H}_2)]$, is not 1 (a fully molecular gas). We adopted $f = 0.8$ and varied x_e between 0 and 10^{-4} . The H₂ ortho-to-para ratio was computed for each gas temperature T . Radiative excitation by the cosmic microwave background ($T_{\text{CMB}} = 2.7\text{ K}$) and by the far-infrared dust continuum in the Orion Bar³⁷ (simulated by optically thin thermal emission at $T_{\text{dust}} = 55\text{ K}$) were also included.

Column densities of $N(\text{HCO}^+) = (5 \pm 1) \times 10^{13}\text{ cm}^{-2}$ and $N(\text{CO}) = (1.0 \pm 0.5) \times 10^{18}\text{ cm}^{-2}$ were estimated using information from our IRAM 30-m telescope line-survey towards the dissociation front³⁸. Several HCO⁺, H¹³CO⁺, HC¹⁸O⁺ and C¹⁸O rotational lines were included in the estimation (the quoted dispersions in the column densities reflect the uncertainty obtained from least square fits to rotational population diagrams). They are consistent with previous observations in the region^{5,6}. Radiative transfer models were run for $N(\text{HCO}^+) = 5 \times 10^{13}\text{ cm}^{-2}$, $N(\text{CO}) = 1.0 \times 10^{18}\text{ cm}^{-2}$, and $N_H = N(\text{H}) + 2N(\text{H}_2) \approx 2 \times 10^{22}\text{ cm}^{-2}$ (equivalent to $A_V \approx 7\text{ mag}$ for the dust properties in Orion). This results in $x(\text{HCO}^+) \approx (2-3) \times 10^{-9}$ and $x(\text{CO}) \approx (2.5-7.5) \times 10^{-5}$ abundances. In addition, the HCO⁺/H¹³CO⁺ column density ratios derived from single-dish observations are similar to the $^{12}\text{C}/^{13}\text{C} = 67$ isotopic ratio in Orion³⁹. Thus, the H¹²CO⁺ lines are not very opaque ($\tau_{\text{line}} \approx 2$) otherwise the observed HCO⁺/H¹³CO⁺ line intensity ratios would be considerably smaller. A non-thermal (turbulent) velocity dispersion (σ_{nth}) of about 1 km s^{-1} reproduces the observed line widths. A similar value, $1.0-1.5\text{ km s}^{-1}$, is inferred directly from the observed line profiles ($\sigma_{\text{nth}}^2 = \sigma_{\text{obs}}^2 - \sigma(T)_{\text{th}}^2$, with $\Delta\nu_{\text{FWHM}} = 2\sqrt{2\ln 2} \times \sigma_{\text{obs}} \approx 3.0 \pm 0.5\text{ km s}^{-1}$ and $T = 300\text{ K}$). Hence, opacity broadening plays a minor role. The dispersion σ_{nth} is similar or lower than the local speed of sound at $T = 100-300\text{ K}$ ($c_{\text{PDR}} = (k_B T/m)^{1/2} = 1.0-1.7\text{ km s}^{-1}$, where m is the mean mass per particle and k_B is the Boltzmann constant). This results in moderate Mach numbers $M = \sigma_{\text{nth}}/c_{\text{PDR}} \leq 1$.

Extended Data Fig. 3 shows model predictions for the CO $J=3-2$ line intensity peak, $T_{\text{peak}}^{\text{CO}3-2}$ (upper left panel), and HCO⁺ $J=4-3$ line integrated intensity, $W_{4-3}^{\text{HCO}^+} = \int T_B dv$ (where T_B is the line brightness temperature) (K km s^{-1}), for different T and n_H values. For optically thick lines ($\tau_{\text{line}} \gg 1$), $T_{\text{peak}}^{\text{CO}3-2}$ provides a good measure of the excitation temperature, with $T_{\text{peak}} \approx J(T_{\text{ex}}) = E_{\text{up}}/k_B \times \left[\exp\left(\frac{E_{\text{up}}}{k_B T_{\text{ex}}}\right) - 1 \right]^{-1}$ (where T_{ex} is the excitation temperature of the transition and

E_{up} is the upper level energy). In addition, for low-critical-density (n_{cr}) transitions such as the low- J CO transitions, the lines are close to thermalization at densities above about 10^4 cm^{-3} , thus $T_{\text{ex}} \rightarrow T$ (with $n_{\text{cr}} \approx A_{ij}/\gamma_{ij}$, where A_{ij} is the Einstein coefficient for spontaneous emission and γ_{ij} is the coefficient of the collisional de-excitation rate). In this case, $T_{\text{peak}}^{\text{CO}3-2}$ is a good thermometer of the $\tau_{\text{CO}3-2} \gg 1$ emitting layers. The HCO⁺ $J=4-3$ line, however, has much higher critical densities ($n_{\text{cr,H}_2} > 5 \times 10^6\text{ cm}^{-3}$ and $n_{\text{cr,e}} \approx 10^3\text{ e cm}^{-3}$). For $n_H < 2n_{\text{cr,H}_2}/\tau_{\text{line}}$ (sub-thermal excitation), the integrated line intensity $W_{4-3}^{\text{HCO}^+}$ is approximately linearly proportional to $N(\text{HCO}^+) = x(\text{HCO}^+)n_H l$ (where l is the cloud length along the line of sight) even if the line is moderately thick. PDR models^{6,7} and CO observations respectively show that $x(\text{HCO}^+)$ and T do not change substantially in the PDR layers around the H₂^{*} emission peaks (cloud depths between $A_V \approx 1$ and 2 mag). In a nearly edge-on PDR, the spatial length along the line of sight does not change greatly either. We compute that for the inferred T and $N(\text{HCO}^+)$ values in the region, the integrated line intensity $W_{4-3}^{\text{HCO}^+}$ is proportional to the density in the $n_H = 10^4-10^6\text{ cm}^{-3}$ range (the correlation coefficient is $r \approx 0.98$ for models with $x_e = 0$ and $x_e = 10^{-4}$). Moreover, $W_{4-3}^{\text{HCO}^+}$ still increases with a density of up to several 10^6 cm^{-3} ($r \approx 0.94$). This reasoning justifies the use of $W_{4-3}^{\text{HCO}^+}$ as a proxy for n_H in the region.

Average physical conditions in the compressed structures. The physical conditions that reproduce the mean CO $J=3-2$ line peak and HCO⁺ $J=4-3$ integrated line intensity towards the compressed structures at $\delta x \approx 15''$ ($T_{\text{peak}}^{\text{CO}3-2} = 164 \pm 10\text{ K}$ and $W_{4-3}^{\text{HCO}^+} = 69 \pm 18\text{ K km s}^{-1}$) are $T = 200-300\text{ K}$ and $n_H = (1.0 \pm 0.5) \times 10^6\text{ cm}^{-3}$ (Extended Data Fig. 3). This implies high thermal pressures, $P_{\text{th,comp}}/k = n_H T \approx (1.0-4.5) \times 10^8\text{ K cm}^{-3}$ (where $P_{\text{th,comp}}$ is the pressure in the compressed gas component). The brightest HCO⁺ emission peaks (with $W_{4-3}^{\text{HCO}^+} \approx 100\text{ K km s}^{-1}$, Fig. 2a) probably correspond to specific gas density enhancements. For the range of column densities and physical conditions at $\delta x \approx 15''$, the gas temperature uncertainty is determined by the lack of higher- J CO lines, observed at high angular resolution, to better constrain T from excitation models. The range of estimated gas densities is dominated by the dispersion (about 25%) of the mean $W_{4-3}^{\text{HCO}^+}$ value.

The above physical conditions suggest that the cloud edge contains substructures that are denser than the atomic layer^{3,4} ($n_H = (4-5) \times 10^4\text{ cm}^{-3}$) and denser than the ambient molecular cloud⁵ ($n_H = (0.5-1.0) \times 10^5\text{ cm}^{-3}$). The equivalent

length of the substructures is small, $l = N_{\text{H}}/n_{\text{H}} \approx (4-12) \times 10^{-3}$ pc (where N_{H} is the total column density of hydrogen nuclei along the line of sight) (about $2''-6''$ at the distance to Orion, thus consistent with their apparent size in the ALMA image). The mass of a cylinder with n_{H} of a few 10^6 cm^{-3} , $2''-6''$ length and width of $2''$ is $\lesssim 0.005 M_{\odot}$ (that is, a mass per unit length of $(0.3-1.0) M_{\odot} \text{ pc}^{-1}$). This is much lower than the virial and critical masses⁴⁰ needed to make them gravitationally unstable (approximately $5 M_{\odot}$, from the inferred gas temperature, density and velocity dispersion). H_2 clumps of similar small masses (several $0.001 M_{\odot}$) have been intuited towards the boundary of more evolved and distant H II regions⁴¹. Compression and fragmentation of ultraviolet-irradiated cloud edges must be a common phenomenon in the vicinity of young massive stars.

Physical conditions in the ambient molecular cloud. Deeper inside the molecular cloud, $T_{\text{peak}}^{\text{CO}3-2}$ smoothly decreases from about 170 K to about 130 K. Therefore, these observations do not suggest temperature spikes at scales of a few arcseconds. Deeper inside the molecular cloud ($\delta x > 30''$ in our rotated images), both $N(\text{H}_2)$ and $N(\text{HCO}^+)$ are expected to gradually increase^{5,6,7,37}. For the expected $N(\text{HCO}^+) \approx 2 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ column density^{5,6}, excitation models show that the gas density in the ambient cloud is $n_{\text{H}} \approx (0.5-1.0) \times 10^5 \text{ cm}^{-3}$ (dashed curves in Extended Data Fig. 3), in agreement with previous estimations^{2,3}. Hence, the over-dense substructures have compression factors of approximately 5–30 with respect to the ambient molecular gas.

Physical conditions in the atomic layer. The decrease of both $T_{\text{peak}}^{\text{CO}3-2}$ and $W_{4-3}^{\text{HCO}^+}$ between the ionization and dissociation fronts is consistent with the expected sharp decrease of CO and HCO^+ abundances in the atomic layer. The representative gas density in the atomic layer, $n_{\text{H}} \approx (4-5) \times 10^4 \text{ cm}^{-3}$, is constrained by the strength of the unattenuated far-ultraviolet flux at the Bar edge^{3,5} ($\chi \approx 4.4 \times 10^4$, determined by the spectral type of the Trapezium stars) and by the current position of the dissociation front at $\delta x \approx 15''$ (refs 1 and 33). The exact gas density value, however, depends on the assumed far-ultraviolet-extinction grain properties (which probably vary as function of cloud depth). In the context of stationary PDR models, larger-than-standard-size grains (lower far-ultraviolet absorption cross-sections) are often invoked³³, otherwise the separation between the dissociation and ionization fronts would be smaller than the observed around $15''$. The lower densities in the atomic layer agree with the observed low H_2 $v = 1-0$ $S(1)/v = 2-1$ $S(1) \approx 3$ line intensity ratio attributed to fluorescent H_2^+ excitation^{32,42}. We note that optically thin CO emission implies $T_{\text{peak}}^{\text{CO}3-2} \ll T_{\text{ex}}$. Hence, $T_{\text{peak}}^{\text{CO}3-2}$ can no longer be used as a gas thermometer in the atomic layer where the CO abundance is low. The gas temperature close to the dissociation front is between $T \approx 500$ K (from H I observations¹³) and $T \approx 300$ K (from carbon radiorecombination⁴³ and [C II] $158 \mu\text{m}$ (ref. 11) line observations).

Emission probability distribution functions (PDF). To study the distribution of gas densities in the region, approximated by the HCO^+ $J = 4-3$ emission, we analysed the probability distribution of the logarithmic emission, given by

$$z = \ln \left(W_{4-3}^{\text{HCO}^+} / \langle W_{4-3}^{\text{HCO}^+} \rangle \right), \text{ where } \langle W_{4-3}^{\text{HCO}^+} \rangle = \int T_{\text{B}} dv \text{ is the mean value in the}$$

observed field-of-view (37 K km s^{-1}). This is a common approach used to interpret (column) density maps, both from observations and MHD simulations^{24,44}. The PDF is computed as the number of pixels (in the high signal-to-noise $W_{4-3}^{\text{HCO}^+}$ image) per intensity bin divided by the total number of pixels. We first analysed the complete field-of-view observed by ALMA and selected $W_{4-3}^{\text{HCO}^+}$ measurements above 5σ , where we define $\sigma = \text{rms}(2\delta v \Delta v_{\text{FWHM}})^{1/2}$, with $\delta v = 0.4 \text{ km s}^{-1}$ and $\Delta v_{\text{FWHM}} = 3.0 \text{ km s}^{-1}$. The resulting PDF is shown in Fig. 2d (magenta points). Second, we selected measurements only in the compressed layers region between $\delta x = 7''$ and $30''$ (with respect to the rotated images in Fig. 2). The resulting PDF (black points) is very close to a log-normal distribution with $p(z) = N_{\text{exp}}(-(z - z_0)^2 / 2\sigma^2)$, where z_0 is the peak value and σ the standard deviation. We obtain $z_0 = 0.165$ and $\sigma = 0.31$ from a fit (green curve). If $W_{4-3}^{\text{HCO}^+}$ is proportional to the gas density, these values imply that 99% of the observed positions in the compressed layers span a factor of about 6 in density. In MHD models, σ is a measure of how density varies in a turbulent cloud. Hence, it depends on the Mach number, the ratio of the thermal to magnetic pressure (β) and the forcing characteristics of the turbulence²⁴. The relatively modest σ value inferred in the $\delta x = 7''-30''$ layer is consistent with the low Mach numbers in the PDR, and suggests an important role of magnetic pressure. We note that a similar analysis of the CO emission does not yield the same log-normal distribution. This is consistent with low- J CO lines being optically thick and tracing gas temperatures rather than gas density variations. This reinforces that the log-normal shape of the $W_{4-3}^{\text{HCO}^+}$ PDF in the compressed layer is a relevant observational result.

Gas pressures, magnetic field and compression. To support the cloud compression and gas photoablation scenario, we investigated the different contributions to the gas pressure in the region. The thermal pressure in the H II region near the ionization front¹ is $P_{\text{th,H II}}/k \approx 2n_{\text{e}}T_{\text{e}} \approx 6 \times 10^7 \text{ K cm}^{-3}$, about six times higher than

the turbulent ram pressure $P_{\text{ram,amb}} = \rho v_{\text{th,amb}}^2$ in the ambient molecular cloud (Extended Data Table 1). As we find similar contributions from the thermal and non-thermal (turbulent) pressures in both the ambient cloud and the over-dense substructures ($\alpha = P_{\text{th,amb}}/P_{\text{th,amb}} \approx P_{\text{nth,comp}}/P_{\text{th,comp}} \approx 1$), it is reasonable to assume equipartition of thermal, turbulent and magnetic energies to quantify the magnetic pressure in the PDR ($P_{\text{B}} = B^2/8\pi$). In particular, for $\beta = P_{\text{B}}/P_{\text{th}} = 1$ we estimate the magnetic field strengths B to be $200 \mu\text{G}$ and $800 \mu\text{G}$ in the ambient and in the high-density substructures, respectively. Such strong magnetic fields at small scales need to be confirmed observationally (both the strength and the orientation) but seem consistent with the high values (approximately $100 \mu\text{G}$) measured in the low-density foreground material⁴⁵ (the Orion Veil) confirming that B is particularly strong in the Orion complex. On much larger spatial scales, low-angular-resolution observations do suggest that B increases with density at H II/cloud boundaries ($B \propto n_{\text{H}}^{0.5-1}$) (ref. 46).

A strong magnetic field would be associated with large magnetosonic speeds (v_{ms}) in the PDR. If an ultraviolet radiation-driven shockwave is responsible for the molecular gas compression, its velocity is predicted to slow down to $v_s \approx 3 \text{ km s}^{-1}$ once it enters the molecular cloud²¹. In such a slow, magnetized shock ($v_s \ll v_{\text{ms}}$), compression waves can travel ahead of the shock front⁴⁷. Thus, a high magnetic field strength may be related to the $W_{4-3}^{\text{HCO}^+}$ undulations seen perpendicular to the Orion Bar (Fig. 2c). The inferred compression factor in the observed substructures ($f = n_{\text{comp}}/n_{\text{amb}} = 5-30$) is consistent with slow shock velocities¹⁶, $v_s = c_0 f^{0.5} \approx 1.5-4.0 \text{ km s}^{-1}$, where c_0 is the initial sound speed of the unperturbed molecular gas. The necessarily small v_s agrees with the relatively narrow molecular line-profiles ($\Delta v_{\text{FWHM}} \leq 4 \text{ km s}^{-1}$) seen in PDRs¹⁴ (including observations of face-on sources in which the shock would propagate in the line of sight). Owing to the high thermal pressure in the compressed structures, we also find that a pressure gradient, with $P_{\text{th,comp}} \geq P_{\text{th,H II}}$ exists. This subtle effect is seen in simulations of an advancing shockwave around an H II region^{22,48}.

Molecular gas between the ionization and dissociation fronts. ALMA reveals fainter HCO^+ and CO emission in the atomic layer (HCO^+ globulets and plume-like CO features at $\delta x < 15''$, Fig. 2). Previous low-angular-resolution observations and models had suggested the presence of dense spherical clumps with sizes of $5''-10''$ deeper inside the molecular cloud^{6,19} (at $\geq 15''-20''$ from the ionization front^{3,6,32}). The dense substructures resolved by ALMA are smaller ($\sim 2'' \times 4''$) and are detected at $\delta x \geq 7''$ (even before the peak of the H_2 vibrational emission).

The molecular line profiles towards the plumes typically show two velocity emission components (Extended Data Fig. 4): one centred at $v_{\text{LSR}} \approx 8.5 \text{ km s}^{-1}$ (where v_{LSR} refers to the emission velocity with respect to the local standard of rest), the velocity of the background molecular cloud in the back-side of M 42 (ref. 11; not directly associated with the Orion Bar), and other at $v_{\text{LSR}} \approx 11 \text{ km s}^{-1}$, the velocity component of the molecular gas in the Orion Bar. In addition, despite the small size of the observed region, the crosscuts of the HCO^+ $J = 4-3$ line velocity centroid and of the FWHM velocity dispersion show gradients perpendicular to the Orion Bar (Extended Data Fig. 4). Moving from the ionization front to the molecular gas, the line centroid shifts to higher velocities (gas compression effects may, in part, contribute to this redshifted velocity). The velocity dispersion, however, shows its maximum between the ionization and the dissociation fronts, the expected layers for photoablative neutral gas flows. Both the kinematic association with the Orion Bar velocities and the higher velocity dispersion between the two fronts are consistent with the presence of gas flowing from the high-pressure compressed molecular layers ($P_{\text{th,comp}}/k \approx 2 \times 10^8 \text{ K cm}^{-3}$) to the atomic layers ($P_{\text{th,atomic}}/k \approx 5 \times 10^7 \text{ K cm}^{-3}$).

HCO^+ chemistry and the C^+/CO transition zone. Static equilibrium PDR models⁶ appropriate to the ambient gas component ($n_{\text{H}} \approx 5 \times 10^4 \text{ cm}^{-3}$) reproduce the separation between the ionization and dissociation fronts. However, they predict HCO^+ abundances near the dissociation front that are too low ($x(\text{HCO}^+)$ of a few 5×10^{-11}) to be consistent with the bright ridge of HCO^+ emission detected by ALMA. These models also predict that the C^+/CO transition should occur ahead of the H/ H_2 transition zone and deeper inside the molecular cloud (at $\delta x \approx 20''$ from the ionization front^{3,4}). However, our detection of bright CO and HCO^+ emission towards the layers of bright H_2 vibrational emission¹ implies that the C^+/CO transition occurs closer to the cloud edge, and nearly coincides with the H/ H_2 transition (at least it cannot be resolved at the approximately $1''$ resolution of our observations). This is probably another signature of dynamical effects. Indeed, the presence of molecular gas near the cloud edge⁴⁹, and a reduced C^+ abundance deeper inside the molecular cloud⁵⁰, may explain model and observation discrepancies of other chemically related molecules.

As an example, stationary PDR models applied to the fluorine chemistry⁵¹ overestimate the CF^+ column density observed towards the Orion Bar⁵² by a factor of about 10. Given that HF readily forms as F atoms react with H_2 molecules, CF^+ must arise from layers where C^+ and H_2 overlap (CF^+ forms through

RESEARCH LETTER

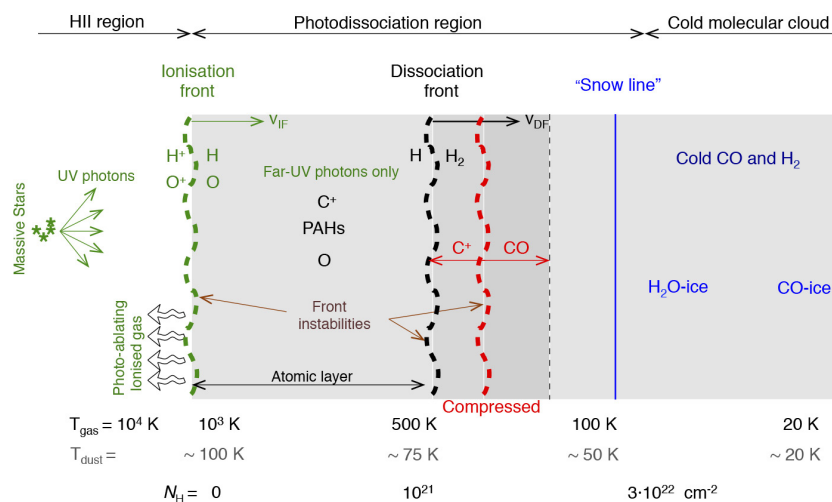
$\text{HF} + \text{C}^+ \rightarrow \text{CF}^+ + \text{H}$ reactions and is quickly destroyed by recombination with electrons^{51,53}. Hence, the (lower-than-predicted) observed CF^+ abundances probably reflect a dynamical PDR behaviour as well.

Stationary PDR models of strongly irradiated dense gas (with n_{H} values of a few 10^6 cm^{-3}) have been presented in the literature^{3,6,7}. The above densities are similar to those inferred in the compressed substructures at the Orion Bar edge. Thus they can be used to gain insight into the chemistry that leads to the formation of HCO^+ and CO in ultraviolet-irradiated dense gas. Owing to the higher densities and enhanced H_2 collisional de-excitation heating, the gas attains high temperatures. This triggers a warm chemistry in which endothermic reactions and reactions with energy barriers become faster. As a result, higher HCO^+ abundances are predicted close to the dissociation front ($x(\text{HCO}^+)$ of several 10^{-9}). Reactions of C^+ with H_2 (either far-ultraviolet-pumped or thermally excited) initiate the carbon chemistry⁵⁴. This reaction triggers the formation of CH^+ (explaining the elevated CH^+ abundances detected by Herschel⁵⁵) and reduces the abundance of C^+ ions and H_2 molecules near the dissociation front; that is, the H/H_2 and the C/CO transition layers naturally get closer (in A_V)⁵⁰. Fast exothermic reactions of CH^+ with H_2 subsequently produce CH_2^+ and CH_3^+ . Both hydrocarbon ions are 'burnt' in reactions with abundant oxygen atoms and contribute to the formation of HCO^+ at the molecular cloud edge. This HCO^+ formation route from CH^+ can dominate over the formation of HCO^+ from CO^+ (after the $\text{O} + \text{H}_2 \rightarrow \text{OH} + \text{H}$ reaction, followed by $\text{C}^+ + \text{OH} \rightarrow \text{CO}^+ + \text{H}$, and finally $\text{CO}^+ + \text{H}_2 \rightarrow \text{HCO}^+ + \text{H}$)^{5,6,32}. Both OH and CO^+ have been detected in the Orion Bar^{56,57}, but high-angular-resolution maps do not exist. Recombination of HCO^+ with electrons then drives CO production near the dissociation front^{6,7}.

Extrapolating the above chemical scenario, the brightest $\text{HCO}^+ J=4-3$ emission peaks in the Orion Bar should be close to H_2 emission peaks. Extended Data Fig. 2a shows a remarkable spatial agreement between the $\text{H}_2 v=1-0 \text{ S}(1)$ emission peaks and several HCO^+ emission peaks. Detailed H_2 excitation models (including both far-ultraviolet-pumping and collisions) show that for the conditions prevailing in the Orion Bar, the intensity of the $\text{H}_2 v=1-0 \text{ S}(1)$ line is approximately proportional to the gas density⁴². Therefore, the HCO^+ peaks that match the position of the $\text{H}_2 v=1-0 \text{ S}(1)$ line peaks probably correspond to gas density enhancements as well. This agrees with the higher $\text{H}_2 v=1-0 \text{ S}(1)/v=2-1 \text{ S}(1) \approx 8$ line intensity ratios observed at the dissociation front and consistent with efficient H_2 collisional excitation³². The ALMA images thus confirm that in addition, or as a consequence of dynamical effects, reactions of H_2 with abundant atoms and ions contribute to shift the molecular gas production towards the cloud edge. Even higher-angular-resolution observations of additional tracers will be needed to fully understand this, and to spatially resolve the chemical stratification expected in the over-dense substructures themselves. We note that if most of the carbon becomes CO at $A_V \approx 2$ (N_{H} of several 10^{21} cm^{-2}) in substructures with gas densities of a few 10^6 cm^{-3} , this depth is equivalent to a spatial length of several 10^{15} cm , or an angular-scale of about $0.5''$ at the distance to Orion.

Deeper inside into the molecular cloud ($\delta x > 30''$), the CO^+ , CH^+ , CH_2^+ and CH_3^+ abundances sharply decrease. The far-ultraviolet flux greatly diminishes, and the gas and dust grain temperatures accordingly decrease. The HCO^+ abundance also decreases until the $\text{CO} + \text{H}_3^+ \rightarrow \text{HCO}^+ + \text{H}$ reaction starts to drive the HCO^+ formation at low temperatures. Gas-phase atoms and molecules gradually deplete and dust grains become coated by ices as the far-ultraviolet photon flux is attenuated at even larger cloud depths (see Extended Data Fig. 1).

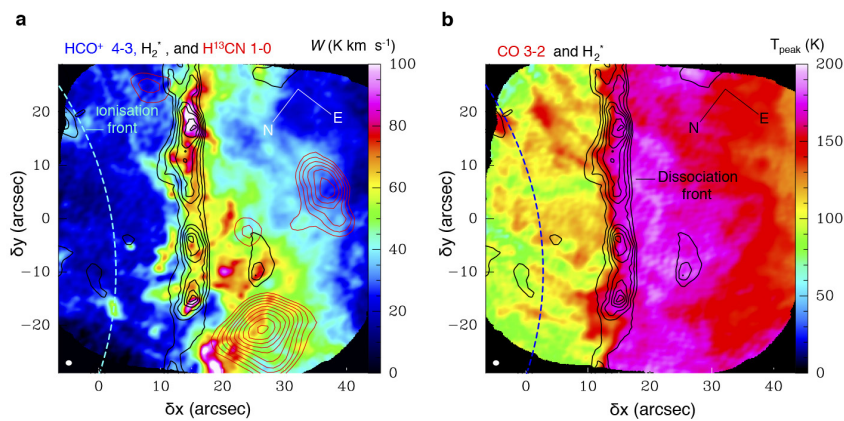
31. Pety, J. & Rodríguez-Fernández, N. J. Revisiting the theory of interferometric wide-field synthesis. *Astron. Astrophys.* **517**, A12 (2010).
32. van der Werf, P. P., Stutzki, J., Sternberg, A. & Krabbe, A. Structure and chemistry of the Orion bar photon-dominated region. *Astron. Astrophys.* **313**, 633–648 (1996).
33. Allers, K. N., Jaffe, D. T., Lacy, J. H., Draine, B. T. & Richter, M. J. H_2 pure rotational lines in the Orion Bar. *Astrophys. J.* **630**, 368–380 (2005).
34. O'Dell, C. R. & Yusef-Zadeh, F. High angular resolution determination of extinction in the Orion Nebula. *Astron. J.* **120**, 382–392 (2000).
35. Cardelli, J. A., Clayton, G. C. & Mathis, J. S. The relationship between infrared, optical, and ultraviolet extinction. *Astrophys. J.* **345**, 245–256 (1989).
36. Goicoechea, J. R. et al. Low sulfur depletion in the Horsehead PDR. *Astron. Astrophys.* **456**, 565–580 (2006).
37. Arab, H. et al. Evolution of dust in the Orion Bar with Herschel. I: radiative transfer modelling. *Astron. Astrophys.* **541**, A19 (2012).
38. Cuadrado, S. et al. The chemistry and spatial distribution of small hydrocarbons in UV-irradiated molecular clouds: the Orion Bar PDR. *Astron. Astrophys.* **575**, A82 (2015).
39. Langer, W. D. & Penzias, A. A. $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ isotope ratio across the Galaxy from observations of $^{13}\text{C}^{18}\text{O}$ in molecular clouds. *Astrophys. J.* **357**, 477–492 (1990).
40. Inutsuka, S.-i. & Miyama, S. M. A production mechanism for clusters of dense cores. *Astrophys. J.* **480**, 681–693 (1997).
41. Noel, B., Joblin, C., Maillard, J. P. & Paumard, T. New results on the massive star-forming region S106 by BEAR spectro-imaging. *Astron. Astrophys.* **436**, 569–584 (2005).
42. Burton, M. G., Hollenbach, D. J. & Tielens, A. G. G. M. Line emission from clumpy photodissociation regions. *Astrophys. J.* **365**, 620–639 (1990).
43. Wyrowski, F., Schilke, P., Hofner, P. & Walmsley, C. M. Carbon radio recombination lines in the Orion Bar. *Astrophys. J.* **487**, L171–L174 (1997).
44. Tremblin, P. et al. Ionization compression impact on dense gas distribution and star formation. Probability density functions around HII regions as seen by Herschel. *Astron. Astrophys.* **564**, A106 (2014).
45. Brogan, C. L., Troland, T. H., Abel, N. P., Goss, W. M. & Crutcher, R. M. in *Astronomical Polarimetry: Current Status and Future Directions* (eds Adamson, A. et al.) 183–184 (ASP Conference Series 343, Astronomical Society of the Pacific, 2005).
46. Planck Collaboration. Planck intermediate results. XXXIV: The magnetic field structure in the Rosette Nebula. *Astron. Astrophys.* **586**, A137 (2016).
47. Roberge, W. G. & Draine, B. T. A new class of solutions for interstellar magnetohydrodynamic shock waves. *Astrophys. J.* **350**, 700–721 (1990).
48. Raga, A. C., Cantó, J. & Rodríguez, L. F. Analytic and numerical models for the expansion of a compact HII region. *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **419**, L39–L43 (2012).
49. Hollenbach, D. J. & Natta, A. Time-dependent photodissociation regions. *Astrophys. J.* **455**, 133–144 (1995).
50. Bertoldi, F. *ISO: A Novel Look at the Photodissociated Surfaces of Molecular Clouds* 67–72 (Special Publication 419, European Space Agency, 1997).
51. Neufeld, D. A. & Wolfire, M. G. The chemistry of interstellar molecules containing the halogen elements. *Astrophys. J.* **706**, 1594–1604 (2009).
52. Neufeld, D. A. et al. Discovery of interstellar CF^+ . *Astron. Astrophys.* **454**, L37–L40 (2006).
53. Guzmán, V. et al. The IRAM-30m line survey of the Horsehead PDR. I: CF^+ as a tracer of C^+ and as a measure of the fluorine abundance. *Astron. Astrophys.* **543**, L1 (2012).
54. Agúndez, M., Goicoechea, J. R., Cernicharo, J., Faure, A. & Roueff, E. The chemistry of vibrationally excited H_2 in the interstellar medium. *Astrophys. J.* **713**, 662–670 (2010).
55. Nagy, Z. et al. The chemistry of ions in the Orion Bar. I. CH^+ , SH^+ , and CF^+ : the effect of high electron density and vibrationally excited H_2 in a warm PDR surface. *Astron. Astrophys.* **550**, A96 (2013).
56. Goicoechea, J. R. et al. OH emission from warm and dense gas in the Orion Bar PDR. *Astron. Astrophys.* **530**, L16 (2011).
57. Stoerzer, H., Stutzki, J. & Sternberg, A. CO^+ in the Orion Bar, M17 and S140 star-forming regions. *Astron. Astrophys.* **296**, L9–L12 (1995).



Extended Data Figure 1 | Structure of a strongly ultraviolet-irradiated molecular cloud edge. The incident stellar ultraviolet radiation comes from the left. The velocity of the advancing ionization and dissociation fronts are represented by v_{IF} and v_{DF} respectively. In the Orion Bar, the

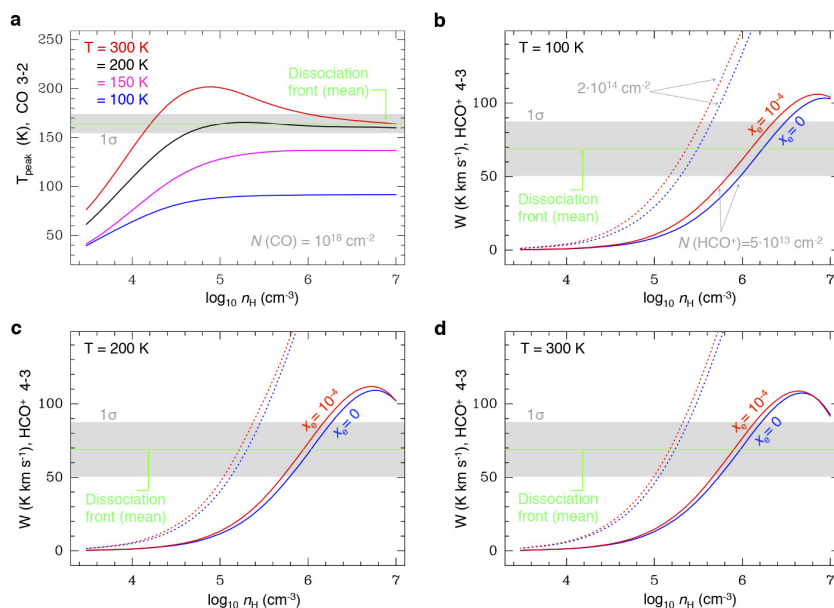
dissociation front is at about $15''$ (about 0.03 pc) from the ionization front. UV, ultraviolet; PAH, polycyclic aromatic hydrocarbons. The snow line refers to the inner cloud layers where molecular gases start to freeze and dust grains become coated by ices.

RESEARCH LETTER



Extended Data Figure 2 | Comparison with other tracers. **a**, ALMA HCO⁺ J=4-3 line integrated intensity. **b**, ALMA CO J=3-2 line peak (Orion Bar velocity component). The red contours represent the H¹³CN J=1-0 emission (from 0.08 to 0.026 in steps of 0.02 Jy beam⁻¹ km s⁻¹) of dense condensations inside the Orion Bar¹⁹. The black contours show the

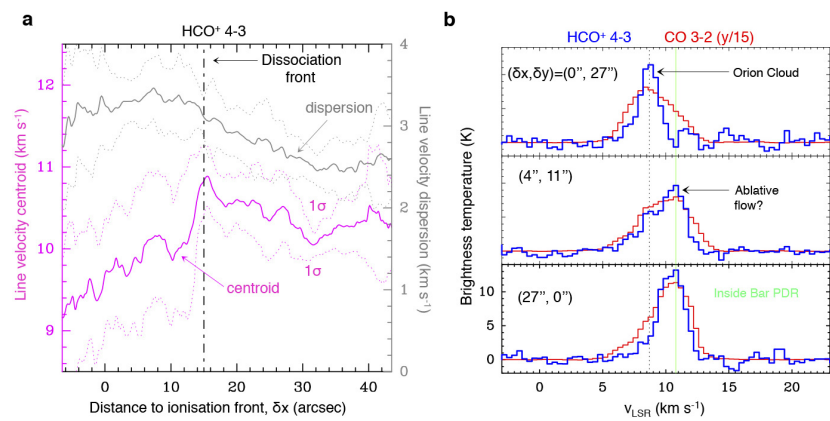
brightest regions of H₂ v=1-0 S(1) emission¹ (from 1.5 to 4.5 in steps of 0.5·10⁻⁴ erg s⁻¹ cm⁻² sr⁻¹). The H₂ image is saturated between δx=19'' and 23'' (that is, no data are shown). Figures have been rotated 127.5° anticlockwise to bring the incident ultraviolet radiation from the left.



Extended Data Figure 3 | Excitation models for different gas temperatures and densities. **a**, CO $J=3-2$ line peak (for $N(\text{CO}) = 10^{18} \text{ cm}^{-2}$). **b–d**, HCO⁺ $J=4-3$ integrated line intensity at 100 K (**b**), 200 K (**c**) and 300 K (**d**). Each curve represents a different electron abundance model: $x_e = 0$ (blue) and $x_e = 10^{-4}$ (red).

Continuous curves are for $N(\text{HCO}^+) = 5 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ and dotted lines for $N(\text{HCO}^+) = 2 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ (appropriate for deeper inside the Orion Bar, $\delta x > 30''$). The horizontal green dashed line represents the average $T_{\text{peak}}^{\text{CO } 3-2}$ (**a**) and $W_{4-3}^{\text{HCO}^+}$ (**b–d**) with their standard deviation (grey shaded) towards the dissociation front (at $\delta x \approx 15''$).

RESEARCH LETTER



Extended Data Figure 4 | Line velocity centroid, dispersion and profiles. a, Vertically averaged cuts perpendicular to the Orion Bar in the HCO⁺ $J=4-3$ line velocity centroid (magenta curve) and FWHM velocity dispersion (grey curve). **b,** CO and HCO⁺ spectra at representative positions. The top and middle plots show positions between the ionization

and dissociation fronts, the bottom plot is inside the molecular Orion Bar. Offsets are given with respect to the rotated images in Extended Data Fig. 2. The velocity of the background cloud is $v_{LSR} \approx 8.5 \text{ km s}^{-1}$ (black dashed line), whereas the velocity of the Orion Bar is $v_{LSR} \approx 11 \text{ km s}^{-1}$ (green line).

Extended Data Table 1 | Gas pressures and estimated magnetic field strengths

	Ionisation front	Atomic layer	Compressed structures	Ambient PDR component
Thermal pressure (K cm ⁻³)	$P_{\text{th,HI}}/k \approx 6 \cdot 10^7$	$P_{\text{th,HI}}/k \leq 5 \cdot 10^7$	$P_{\text{th,comp}}/k \approx 2 \cdot 10^8$	$P_{\text{th,amb}}/k \approx 10^7$
Non-thermal pressure* (K cm ⁻³)			$P_{\text{nth,comp}}/k \approx 2 \cdot 10^8$	$P_{\text{nth,amb}}/k \approx 10^7$
Magnetic field B (for $\beta=P_B/P_{\text{th}}=1$)			$\approx 800 \mu\text{Gauss}$	$\approx 200 \mu\text{Gauss}$

All values are for a non-thermal velocity dispersion of $\sigma_{\text{nth}} \approx 1 \text{ km s}^{-1}$.

Capítulo 13

Resumen general y conclusiones

En esta tesis doctoral se presenta un estudio detallado de la Barra de Orión, con el principal objetivo de establecer las condiciones físicoquímicas, el contenido molecular y los procesos químicos dominantes en PDRs altamente irradiadas por radiación FUV ($6\text{ eV} < h\nu < 13.6\text{ eV}$). Los fotones en el rango FUV emitidos por estrellas masivas de tipo OB influyen en la dinámica, ionización, calentamiento y química del medio interestelar neutro (hidrógeno atómico no ionizado). Los procesos físicos y químicos que ocurren en las PDRs interestelares permiten estudiar los efectos radiativos de las estrellas masivas que generan las regiones HII en el medio interestelar que las rodea, y por lo tanto, son necesarios para comprender la evolución del medio interestelar de nuestra galaxia y de objetos más distantes. El Complejo de Orión alberga la región de formación de estrellas masivas más cercana ($\sim 414\text{ pc}$), por ello es la región más apropiada para estudiar, en alta resolución espacial, los efectos de la radiación FUV procedentes de estrellas masivas OB sobre la nube molecular parental. Las estrellas masivas del Trapecio han creado una región HII que, en su extremo más alejado, está confinada por la nube molecular OMC–1. Una de las interfases entre la región HII y OMC–1 es la región de fotodisociación de la Barra de Orión. Las estrellas del Trapecio iluminan la Barra con un campo de radiación FUV $\gtrsim 10^4$ veces el campo interestelar medio, lo que proporciona a la región unas propiedades químicas y físicas características. Debido a su cercanía y a su orientación casi de canto (en el plano del cielo), es posible hacer estudios sobre la estratificación química del gas en esta región, desde el gas ionizado hasta el gas neutro, en función de la distan-

cia desde la fuente de ionización, e investigar la estructura y dinámica del gas molecular irradiado por altos flujos de radiación FUV. La Barra de Orión es un referente para la comprensión de la emisión molecular de otras PDRs mucho más lejanas y tenues (como las galaxias con brotes de formación estelar) o no resueltas espacialmente (como los discos protoplanetarios irradiados, conocidos como *proplyds*).

Los barridos espectrales son una de las herramientas más importantes en el campo de la astroquímica ya que permiten una caracterización química completa de la región objeto de estudio. Un barrido espectral de una PDR como la Barra de Orión ofrece la oportunidad de determinar el contenido químico en ambientes irradiados por intensos campos de radiación FUV. Con este objetivo, se inició en el año 2009 un barrido espectral con el radiotelescopio IRAM de 30 m de diámetro, que se encuentra situado a 2850 m de altitud en Pico Veleta, en Sierra Nevada (Granada, España). IRAM-30m es uno de los radiotelescopios más grandes y más sensibles en el dominio de las ondas milimétricas. Hemos observado más de 100 h en distintas campañas de observación desde 2009 hasta 2015, para completar el primer barrido espectral a 3 mm (80 – 118 GHz), 2 mm (128 – 176 GHz), 1 mm (202 – 305 GHz) y 0.8 mm (328 – 359 GHz) realizado en el frente de disociación de la Barra de Orión (i.e. el borde irradiado y caliente de la PDR), cubriendo un ancho de banda total de $\sim 220\text{ GHz}$. El análisis de las líneas espectrales de emisión que se detectan en el espectro milimétrico de esta fuente nos ha permitido elaborar un censo completo de las moléculas presentes en la

región de estudio y comparar la riqueza química de la Barra con distintos ambientes interestelares.

Nuestro barrido espectral del frente de disociación de la Barra de Orión evalúa los límites de la complejidad química en ambientes fuertemente irradiados por radiación FUV. Se pensaba que estas regiones estarían dominadas por especies simples, a diferencia de los *hot cores* y *hot corinos* donde se detectan fácilmente moléculas orgánicas complejas, pero nuestras observaciones muestran que esta región posee una notable riqueza química. Se han identificado más de 850 líneas pertenecientes a las transiciones rotacionales de ~ 60 especies moleculares con hasta siete átomos, algunas de ellas detectadas por primera vez en la Barra de Orión y en el medio interestelar. Entre las especies detectadas hay moléculas simples que son comunes en el medio interestelar (e.g. CO, CS, SO₂, CN, HCO⁺), iones reactivos (SH⁺, HOC⁺, CO⁺, SO⁺ y CF⁺), hidrocarburos (C₂H, l-C₃H, l-C₃H⁺, c-C₃H, C₄H, c-C₃H₂ y l-H₂C₃), e incluso moléculas complejas (e.g. CH₃COH, CH₃CN, CH₃CHO). Hemos detectado isotopómeros (con los isótopos D, ¹³C, ¹⁸O, ¹⁷O, ³⁴S, ³³S y ¹⁵N), isotopómeros (e.g. ¹³CCH y C¹³CH), isómeros estructurales (HCN/HNC y HCO⁺/HOC⁺) y conformeros (cis y trans-HCOOH). Se han detectado un gran número de líneas de recombinación de hidrógeno y helio lo que indica la presencia de gas ionizado en la región HII vecina (emisión captada por el haz del telescopio a 3 mm y 2 mm). También se han detectado líneas de recom-

binación de carbono, las cuales tienen características espectrales diferentes a las de hidrógeno y helio, y se originan en el frente de disociación de la Barra de Orión.

Estas observaciones se han complementado con cartografiados de líneas rotacionales excitadas (para trazar el gas molecular templado) a 0.8 mm con una resolución angular de $\sim 7''$ utilizando el radiotelescopio IRAM-30m, con el objetivo de poner la posición observada del barrido espectral en el contexto de la emisión a gran escala de la Barra y estudiar la estratificación química de la región, desde el gas fuertemente irradiado en la superficie de la PDR hasta las capas más protegidas de la radiación FUV. También hemos obtenido las primeras imágenes espectrales en alta resolución angular ($\sim 1''$) con el interferómetro ALMA para estudiar la morfología y actividad en el borde iluminado de la Barra. La interpretación de todas estas observaciones se ha realizado utilizando catálogos de espectroscopía molecular, modelos de excitación no-LTE y de transferencia de radiación en líneas moleculares desarrollados por el grupo de Astrofísica Molecular (ICMM-CSIC), así como el modelo de PDRs Meudon para interpretar los procesos químicos en fase gas y el balance de energía de las regiones de fotodisociación.

Los **principales resultados científicos y conclusiones** obtenidos en esta tesis doctoral se resumen a continuación:

1. Estudio de la química y distribución espacial de hidrocarburos sencillos en una PDR intensamente irradiada. Cuadrado et al. 2015 (A&A)

Desde los años 70 se ha hecho evidente que los hidrocarburos son especies comunes en el medio interestelar. Se han detectado en regiones con propiedades físicas y químicas muy diferentes, desde nubes difusas hasta nubes oscuras y frías. En nuestro barrido espectral en el borde iluminado de la Barra de Orión hemos detectado más de 200 líneas que pertenecen a hidrocarburos: C₂H ($N(\text{C}_2\text{H})/N_{\text{H}} \simeq 10^{-8}$), C₄H, c-C₃H₂, c-C₃H, C¹³CH, ¹³CCH, l-C₃H, l-C₃H⁺, y l-H₂C₃ ($N(\text{l-H}_2\text{C}_3)/N_{\text{H}} \simeq 10^{-11}$), en orden decreciente de abundancia. De hecho, presentamos la primera detección de los hidrocarburos c-C₃H, l-C₃H, C₄H y l-H₂C₃ en la

Barra de Orión, y la primera detección de los isotopómeros C¹³CH y ¹³CCH en una PDR. Hemos detectado nueve líneas rotacionales del catión l-C₃H⁺, lo que ha permitido mejorar sus constantes espectroscópicas fundamentales. No hemos detectado aniones o isotopólogos deuterados, pero hemos calculado los siguientes límites superiores de abundancia: $[\text{C}_2\text{D}]/[\text{C}_2\text{H}] < 0.2\%$, $[\text{C}_2\text{H}^-]/[\text{C}_2\text{H}] < 0.007\%$ y $[\text{C}_4\text{H}^-]/[\text{C}_4\text{H}] < 0.05\%$. Estas observaciones se han complementado con mapas $\sim 2' \times 2'$ de la emisión de los hidrocarburos C₂H ($N = 1 \rightarrow 0$ y $3 \rightarrow 2$) y c-C₃H₂ ($J_{K_a, K_c} = 2_{1,2} \rightarrow 1_{0,1}$ y $6_{1,6} \rightarrow 5_{0,5}$) y con observaciones ya

existentes de la emisión a $8\ \mu\text{m}$ debida fundamentalmente a PAHs.

Hemos determinado la temperatura de rotación (T_{rot}) y la densidad de columna (N) de todas las especies detectadas con la construcción de diagramas rotacionales. El gran número de líneas detectadas de cada molécula permite determinar con precisión estos parámetros. A partir de los resultados de este análisis, (i) hemos encontrado indicios (elevada T_{rot}) de que la excitación de C_4H y $\text{l-C}_3\text{H}^+$ puede estar afectada por el bombeo radiativo de fotones IR emitidos por el polvo; (ii) hemos obtenido un cociente orto/para $\simeq 3$ para el $\text{c-C}_3\text{H}_2$, similar al valor esperado a alta temperatura; (iii) la baja relación $[\text{c-C}_3\text{H}]/[\text{l-C}_3\text{H}] \leq 3$ observada en la Barra de Orión confirma que el frente de disociación es un ambiente con una alta abundancia de electrones (x_e); (iv) hemos obtenido un cociente $[\text{C}^{13}\text{CH}]/[\text{C}^{13}\text{CCH}] \simeq 1.4 \pm 0.1$, lo cual implica que los procesos de fraccionamiento afectan de forma diferente a los dos isótopos ^{13}C del C_2H . Hemos estimado las condiciones físicas (promediadas dentro del haz del telescopio) de la posición observada de la Barra a partir de modelos de transferencia radiativa no-LTE LVG con MADEX para aquellas moléculas con tasas de colisión inelásticas conocidas (C_2H y $\text{c-o/p-C}_3\text{H}_2$). Los mejores ajustes para C_2H se obtienen para $T_k \gtrsim 150\ \text{K}$ y $n(\text{H}_2) \gtrsim 10^5\ \text{cm}^{-3}$. Para ajustar las líneas de $\text{c-C}_3\text{H}_2$ se requieren temperaturas más bajas y densidades ligeramente más altas. También hemos desarrollado modelos fotoquímicos en fase gas con el código Meudon que reproducen (en un factor ~ 3) las abundancias de los hidrocarburos simples observados.

Con el objetivo de investigar el papel de la radiación FUV y la densidad del gas en la formación de hidrocarburos, se ha realizado un estudio comparativo con las abundancias de C_2H y $\text{c-C}_3\text{H}_2$ en otros entornos interestelares con diferentes características físicas. Las observaciones en diferentes entornos astrofísicos sugieren que la relación de abundancias entre $[\text{C}_2\text{H}]/[\text{c-C}_3\text{H}_2]$ aumenta al incrementarse el valor de χ/n_{H} , parámetro que controla muchas de las

propiedades de una PDR.

A pesar de que existen numerosos estudios sobre la abundancia y procesos de formación de hidrocarburos en diferentes condiciones físicas y químicas, todavía no se conoce con exactitud cómo se forman en el medio interestelar ni su relación con los PAHs y VSGs. Las abundancias calculadas a partir de observaciones realizadas en nubes difusas o en PDRs irradiadas con un bajo flujo de fotones FUV, como la PDR de Cabeza de Caballo, son significativamente más altas que las que predicen los modelos teóricos que solo tienen en cuenta la química en fase gas. Este hecho junto con la buena correlación espacial que se observa entre la emisión de hidrocarburos y la emisión de PAHs en la PDR de Cabeza de Caballo apoyó la hipótesis de que la fotoerosión de los PAHs y de los pequeños granos de polvo dominan la formación de hidrocarburos.

Pero en la Barra de Orión, una PDR con flujos de radiación FUV > 300 veces más altos que en Cabeza de Caballo, los modelos de química en fase gas sí reproducen las abundancias observadas de los hidrocarburos sencillos y la distribución espacial observada de la emisión de C_2H y $\text{c-C}_3\text{H}_2$ es similar pero no coincide con la emisión a $8\ \mu\text{m}$ debida a los PAHs. Además, la detección del ion intermediario $\text{l-C}_3\text{H}^+$ exclusivamente en PDRs demuestra que la química de hidrocarburos en regiones irradiadas es diferente a la de nubes oscuras protegidas de la radiación. Con estos resultados se puede concluir que la fotodestrucción de PAHs no es un requisito necesario para explicar las abundancias de los hidrocarburos observados en PDRs iluminadas por altos flujos de radiación FUV. En estas regiones, el gas molecular alcanza temperaturas más altas y se vuelven eficientes nuevas rutas de formación en fase gas. En particular, las reacciones endotérmicas (o con barreras de activación) entre C^+ , radicales y H_2 pueden dominar la formación de estas especies. Sin embargo, la foto-erosión de PAHs/HACs/VSGs y la química de superficie de los granos de polvo carbonáceos pueden ser necesarias para explicar la abundancia de los hidrocarburos más complejos.

2. Detección de una nueva especie en el medio interestelar, cis-HCOOH, y la interpretación de su proceso de formación como un mecanismo de fotoisomerización. Cuadrado et al. 2016 (A&A)

De los dos conformeros del ácido fórmico, trans- y cis-HCOOH, el conformero trans es el más estable y fue el primer ácido detectado en el medio interestelar. El trans-HCOOH se ha observado en *hot cores*, *hot corinos*, nubes frías y oscuras, y en la coma de cometas como Hale–Bopp. También está presente en los hielos interestelares y en los meteoritos condriticos. La barrera de energía de la rotación interna para la conversión del conformero trans al cis es de $\sim 4827 \text{ cm}^{-1}$ (Hocking 1976), aproximadamente 7000 K en unidades de temperatura. Esta temperatura es mucho más elevada que la energía térmica disponible en las nubes moleculares por lo que se podría esperar que en las nubes del medio interestelar solo existiese el conformero más estable de una especie dada. Nosotros hemos detectado por primera vez en el medio interestelar el conformero menos estable del ácido fórmico, el cis-HCOOH. Su presencia exclusiva en el gas fuertemente irradiado por radiación FUV (en la región de fotodisociación de la Barra de Orión), con un cociente de abundancias muy bajo ($\text{trans/cis} \simeq 2.8 \pm 1.0$), apoya un mecanismo

de formación mediante fotoisomerización: un conformero dado absorbe un fotón de alta energía que excita radiativamente a la molécula a estados electrónicos por encima de la barrera de energía de la interconversión. La posterior desexcitación radiativa al estado fundamental (fluorescencia) dejaría a la molécula en un conformero diferente. En colaboración con físicoquímicos teóricos del CSIC y de la UAM se calcularon por métodos cuánticos *ab-initio* las secciones eficaces de absorción y fluorescencia alrededor de 5 eV del HCOOH, así como las probabilidades de fotoisomerización $\text{cis} \rightarrow \text{trans}$ que explicarían el bajo cociente de abundancias trans/cis observado en la Barra.

Hasta ahora, la isomerización por absorción de fotones FUV no se había considerado como un posible mecanismo para inducir cambios estructurales en las moléculas en el gas interestelar. La detección del cis-HCOOH en la Barra de Orión abre nuevas vías para detectar otros conformeros menos estables en el espacio. Esto podría tener numerosas implicaciones en astroquímica y astrobiología.

3. Detección de moléculas orgánicas complejas en una región irradiada por un campo UV intenso. Cuadrado et al. 2017 (A&A)

Las moléculas orgánicas complejas (COMs) se detectan en muchos ambientes interestelares y circunestelares (e.g. *hot cores*, *hot corinos*, envolturas alrededor de estrellas evolucionadas, cometas, meteoritos, flujos protoestelares, núcleos fríos protegidos de la radiación UV estelar, etc.). La desorción (térmica, química, por impacto de rayos cósmicos o inducido por fotones secundarios) o fotodesorción de los mantos de hielo que recubren los granos de polvo y posteriores reacciones químicas en fase gas son los principales mecanismos de formación de COMs en el medio interestelar. Recientemente se ha empezado a investigar la presencia y formación de COMs en ambientes iluminados por radiación FUV. Las abundancias moderadas detectadas en la PDR de Cabeza de Caballo (mayores que las de una condensación fría cercana que se encuentra protegida de la radiación FUV) sugieren que los procesos de fotodesorción en

los mantos de hielo podrían estar dominando la formación de COMs. Nosotros hemos investigado la presencia y abundancia de COMs en el frente de disociación de la Barra de Orión (con las observaciones del barrido espectral), con flujos de radiación FUV > 300 veces más altos que en Cabeza de Caballo, donde los granos de polvo no están recubiertos por mantos de hielo ($T_d < 30 \text{ K}$ en Cabeza de Caballo y $T_d > 60 \text{ K}$ en la Barra de Orión). También hemos analizado mapas de intensidad integrada de $\text{C}^{18}\text{O } J=3 \rightarrow 2$ y $\text{H}_2\text{CO } J_{K_a, K_c} = 5_{1,5} \rightarrow 4_{1,4}$ con una resolución de $8.5''$, con el objetivo de poner la posición observada del frente de disociación en el contexto de la emisión a gran escala de la Barra.

A pesar de que el borde irradiado de la PDR de la Barra de Orión es un ambiente hostil donde no se espe-

raría encontrar altas abundancias de moléculas complejas, nuestras observaciones muestran espectros relativamente ricos con más de 250 líneas pertenecientes a COMs y a sus precursores: H_2CO ($N(\text{H}_2\text{CO})/N_{\text{H}} \simeq 10^{-9}$), CH_3OH , HCO , H_2CCO , CH_3CHO , H_2CS , HCOOH , CH_3CN , CH_2NH , HNCO , H_2^{13}CO y HC_3N ($N(\text{HC}_3\text{N})/N_{\text{H}} \simeq 10^{-11}$), en orden decreciente de abundancia. Las moléculas CH_2NH , HC_3N , CH_3CN y CH_3CHO se han detectado por primera vez en la Barra de Orión.

Hemos determinado la temperatura de rotación (T_{rot}) y la densidad de columna (N) de las especies detectadas con la construcción de diagramas rotacionales. Debido a la compleja espectroscopía de algunas moléculas orgánicas y a las condiciones de excitación subtérmica predominantes en la Barra, la correcta determinación de las densidades de columna para especies simétricas y asimétricas como H_2CO , H_2CS , H_2CCO , CH_3OH y CH_3CN requiere construir diagramas rotacionales específicos para cada escalera rotacional. Se han obtenido temperaturas rotacionales semejantes para cada especie orto/para y A/E, y cocientes orto/para $\simeq 3$. Se ha calculado un límite superior de la columna de densidad y abundancia para algunas moléculas orgánicas que no han sido detectadas en el barrido espectral, pero que sí están presentes en otras regiones de formación estelar: CH_3O , HDCO , CH_3NC , CH_3CCH , CH_3OCH_3 , HCOOCH_3 , $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$, CH_2CHCN y $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CN}$. La no detección de HDCO en el borde iluminado de la Barra ($[\text{HDCO}]/[\text{H}_2\text{CO}] < 0.003$) es consistente con el menor papel de la deuteración en fase gas a temperaturas muy altas. Hemos estimado las condiciones físicas (promediadas dentro del haz del telescopio) de la posición observada de la Barra a partir de modelos de transferencia radiativa no-LTE LVG con MADEX para aquellas moléculas con tasas de colisión inelásticas conocidas (H_2CO , HC_3N , CH_3CN y CH_3OH). Este análisis sugiere que algunas COMs surgen de diferentes capas de la PDR, pero nuestras observaciones no resuelven la distribución espacial de estas especies. En particular, H_2CO y CH_3CN sobreviven en el gas que está directamente expuesto a la radiación FUV ($T_{\text{k}} = 150 - 250$ K y $n(\text{H}_2) = (1 - 3) \times 10^6 \text{ cm}^{-3}$), mientras que CH_3OH sólo proviene de los *clumps* en el interior de la PDR que son más densos, fríos y están más protegidos de la radiación FUV ($T_{\text{k}} = 40 - 50$ K y $n(\text{H}_2) = 5 \times 10^7 \text{ cm}^{-3}$). El modelo que mejor ajusta las líneas de HC_3N tiene unas condiciones físicas intermedias entre el gas directamente expuesto a la

radiación y los *clumps* más fríos y densos: $T_{\text{k}} = 70 - 90$ K y $n(\text{H}_2) > 1 \times 10^6 \text{ cm}^{-3}$. El mapa de intensidad integrada de H_2CO $J_{K_a, K_c} = 5_{1,5} \rightarrow 4_{1,4}$ muestra que el H_2CO está presente en el gas caliente del *interclump* y sobrevive cerca del borde de la PDR donde el flujo de radiación FUV es alto, confirmando los resultados del análisis de excitación no-LTE LVG. También hemos realizado un estudio comparativo de las abundancias de COMs en otros entornos interestelares.

La relación de abundancias calculada para la Barra de Orión es $\text{HCO}/\text{H}_2\text{CO}/\text{CH}_3\text{OH} \simeq 1/5/3$. Estas abundancias relativas son diferentes de las inferidas en *hot cores* y choques, ambientes dominados por la desorción térmica de las moléculas del manto de hielo de los granos de polvo o por la erosión del grano en los choques de alta velocidad. Además, en general los modelos en fase gas tienen problemas para reproducir las abundancias observadas de H_2CO y especialmente de CH_3OH en las PDRs. Teniendo en cuenta las elevadas temperaturas del gas y del polvo en el borde de la Barra (ya son, en su mayoría, granos sin manto de hielo), sugerimos los siguientes escenarios para la formación de COMs: (i) a través de reacciones en fase gas a alta temperatura que aún no han sido incluidas en los modelos de química actuales; (ii) por procesos químicos en la superficie del grano de polvo caliente; o (iii) la dinámica de la PDR hace que las COMs o sus especies precursoras, que se han formado en los mantos helados de los granos de polvo en el interior de la nube molecular (y en una etapa evolutiva anterior a la irradiación FUV procedente de las estrellas del Trapecio), se desorban y lleguen hasta el borde de la PDR.

La presencia de COMs en el medio interestelar es más generalizada de lo que se esperaba hasta hace muy pocos años, incluyendo ambientes extremos como el gas en los choques de alta velocidad y el gas altamente iluminado con radiación FUV. La formación de las COMs refleja la complicada interacción entre la química en fase gas y la química en la superficie de los granos. Sin embargo, las rutas de formación no están completamente definidas y pueden incluso no ser las mismas en diferentes entornos. Se necesitan más experimentos de laboratorio para investigar los diferentes procesos químicos que se producen en la superficie de los granos, e investigar los productos y las tasas de desorción de mecanismos como la fotodesorción, sublimación, desorción química, etc. para poder entender la formación de COMs en los diferentes ambientes interestelares.

4. Primera detección de líneas de emisión del ion reactivo SH^+ desde un observatorio terrestre y corrección de sus frecuencias de línea. Müller et al. 2014 (A&A)

Se ha utilizado el interferómetro ALMA y el radiotelescopio IRAM-30m para la detección de las dos líneas de rotación más bajas en frecuencia (~ 346 GHz) y energía ($E_u/k = 16.6$ K) del ion reactivo SH^+ en el frente de disociación de la Barra de Orión. Las frecuencias predichas por los datos de laboratorio no eran correctas y estaban desplazadas ~ 15 MHz a frecuencias más bajas que las observadas. En colaboración con espectroscopistas de la Universidad de Colonia, se llevo a cabo la corrección y la nueva determi-

nación de las frecuencias de las líneas rotacionales y de las constantes espectroscópicas del ion reactivo SH^+ a partir de nuestras observaciones. Posteriormente a la publicación estos resultados, este ion reactivo se ha vuelto a estudiar en el laboratorio confirmando nuestras detecciones y cálculos espectroscópicos (Halfen & Ziurys 2015). Las predicciones actualizadas del espectro de rotación de SH^+ están disponibles en el catálogo CDMS.

5. Obtención de las primeras imágenes en alta resolución angular de la emisión de iones reactivos SH^+ , HOC^+ y SO^+ en el medio interestelar con el interferómetro ACA–ALMA.

Goicoechea, Cuadrado et al. 2017 (A&A)

Los iones reactivos (e.g. CH^+ , SH^+ , HOC^+ , SO^+ , CO^+ , CF^+) son uno de los mejores trazadores de PDRs e indican de forma inequívoca la presencia de fotones UV. Tienen una vida media muy breve (en la Barra de Orión algunos iones solo sobreviven unas pocas horas) ya que la escala de tiempo para que se produzcan colisiones reactivas con H_2 , H o e^- es comparable o más corta que los tiempos típicos en los que se producen colisiones inelásticas. La abundancia de estos iones solo es significativa en las capas más calientes e iluminadas de las PDRs o en las nubes difusas, ya que se puede mantener una densidad elevada de sus especies parentales: C^+ (e.g. $\text{C}^+ + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{HOC}^+ + \text{H}$) y S^+ (e.g. $\text{S}^+ + \text{H}_2^* \rightarrow \text{SH}^+ + \text{H}$ y $\text{S}^+ + \text{OH} \rightarrow \text{SO}^+ + \text{H}$). Aunque han sido detectados en observaciones de baja resolución angular en algunos entornos astrofísicos (e.g. nubes irradiadas con radiación UV cerca de estrellas masivas, nubes difusas, nebulosas de reflexión, etc.), hasta ahora no ha sido posible resolver espacialmente el frente de disociación de las PDRs donde tiene lugar la formación de estas especies, cuya extensión es de $\Delta A_V \lesssim 1$ mag (unos pocos segundos de arco en la Barra de Orión). Por lo tanto, la distribución espacial detallada de la emisión de iones reactivos era, hasta ahora, en su mayoría desconocida.

Presentamos las primeras imágenes en alta resolución angular ($4.9'' \times 3.0''$) de la emisión a 0.8 mm de los iones

reactivos SH^+ , HOC^+ y SO^+ en el medio interestelar utilizando el interferómetro ACA–ALMA. Hemos analizado también las líneas rotacionales de estas especies detectadas en el barrido espectral realizado con IRAM-30m entre 80 – 360 GHz, con el objetivo de comprender su excitación y determinar sus abundancias en el frente de disociación de la Barra.

Observamos que la emisión de SH^+ y HOC^+ está restringida a una región estrecha entre $2'' - 10''$ de ancho (entre $\sim 800 - 4000$ AU dependiendo de la geometría asumida para la PDR) que sigue la emisión del H_2^* . Ambos iones se forman eficientemente muy cerca de la zona de transición H/H_2 , a una profundidad de $A_V \lesssim 1$ mag en la nube neutra, donde coexisten altas abundancias de C^+ , S^+ y H_2^* . Las especies observadas tienen temperaturas de rotación bajas ($T_{\text{rot}} \approx 10 - 30$ K $\ll T_k$) y anchos de línea estrechos ($\Delta v \simeq 2 - 3$ km s $^{-1}$), un factor ~ 2 más estrechos que los del ion reactivo más ligero CH^+ . Esto es consistente con la mayor reactividad y la mayor velocidad de bombeo radiativo del CH^+ (Nagy et al. 2013) en comparación con los iones más pesados, los cuales son conducidos más rápidamente hacia una dispersión de velocidades más pequeña mediante colisiones elásticas y hacia temperaturas rotacionales menores debido al mayor número de colisiones inelásticas. Hemos estimado que las densi-

dades de columna de las especies observadas oscilan entre 10^{11} cm^{-2} (asumiendo llenado uniforme del haz del telescopio) y 10^{14} cm^{-2} (asumiendo emisión en filamento). Se han estimado las condiciones físicas (promediadas dentro del haz del telescopio) que producen la emisión observada de H^{13}CO^+ , HOC^+ , SO^+ y SO a partir de mo-

delos de excitación Montecarlo ($n(\text{H}_2) \simeq 10^5 - 10^6 \text{ cm}^{-3}$, $n(e^-) = 10 \text{ cm}^{-3}$ y $T_k \gtrsim 200 \text{ K}$). El SH^+ y HOC^+ trazan claramente las capas de la superficie de la nube molecular más expuestas a la radiación UV, mientras que el SO^+ surge de capas ligeramente más protegidas en el interior.

6. Primera imagen en alta resolución del borde de la nube molecular de Orión. Goicoechea, Pety, Cuadrado et al. 2016 (Nature)

Se han obtenido las primeras imágenes espectrales con el interferómetro ALMA de la Barra de Orión. Hemos llevado a cabo el estudio de la dinámica y la morfología del borde iluminado de la nube de Orión en escalas espaciales muy pequeñas, con una resolución angular de $\sim 1''$ ($\sim 414 \text{ AU}$). Las imágenes revelan subestructuras de alta densidad, inestabilidades y flujos de gas que se fotoevaporan en el extremo irradiado de la nube molecular. Los resultados sugieren que el borde de la nube ha sido comprimido por una onda de alta presión ($P/k \approx 10^8 \text{ K cm}^{-3}$) que se está moviendo hacia la nube molecular, demostrando que los efectos dinámicos y

de no equilibrio son importantes para la evolución de la nube. Las zonas de transición H/H_2 y $\text{C}^+/\text{C}/\text{CO}$ están mucho más cerca entre sí que las predicciones de los modelos de PDR estacionarios que han estado vigentes las últimas décadas. Dentro del contexto de los mecanismos capaces de inducir y regular la formación de estrellas, las subestructuras de alta densidad formadas por la compresión del gas en el borde iluminado de la nube podrían en un futuro dar lugar a condensaciones más masivas que evolucionen a la formación de una nueva generación de estrellas de baja masa.

Todos estos resultados han sido recogidos en siete artículos científicos publicados en las revistas con sistema de arbitraje A&A y Nature. Estos trabajos muestran una perspectiva totalmente diferente de la química, la morfología y dinámica de las nubes interestelares irradiadas por intensos flujos de fotones FUV. Los resultados obtenidos en esta

tesis doctoral tendrán una continuación natural con nuevas observaciones con ALMA, SOFIA (observaciones de las líneas de estructura fina de $[\text{CII}]$ $158 \mu\text{m}$ y $[\text{OI}]$ $63 \mu\text{m}$ en el infrarrojo lejano), JWST (observación de la emisión de H_2 , PAHs y polvo) tanto en la Barra de Orión, como en otras regiones de formación de estrellas masivas.

Parte III

Apéndices

Apéndice A

Espectroscopía Rotacional

A.1. Presentación general

La espectroscopia rotacional estudia las transiciones entre los distintos niveles de energía de una molécula debido a la modificación de su estado rotacional. La emisión en líneas rotacionales tiene lugar dentro del rango FIR (hidruros ligeros), submilimétrico y milimétrico (moléculas poliatómicas con átomos pesados). Las moléculas diatómicas y poliatómicas lineales presentan un espectro de rotación sencillo, en cambio, el espectro rotacional de moléculas poliatómicas no lineales es complejo, y su energía depende del eje de rotación de la molécula. La clasificación de las moléculas y la localización de los ejes principales de inercia (I_a , I_b , I_c ; por convenio, el eje a es el que tiene un momento de inercia menor y el c mayor, $I_c \gtrsim I_b \gtrsim I_a$) se realiza con la ayuda de la simetría molecular, la cual clasifica a las moléculas en cuatro grupos distintos: lineales, trompo-esféricas, trompo-simétricas y trompo-asimétricas. En la Tabla A.1 se muestra la clasificación de las moléculas en función de su simetría. En la Fig. A.1 se muestra como se lleva a cabo esta clasificación en base a la simetría de la molécula.

Para que una molécula presente transiciones rotacionales (permitidas, de tipo dipolar eléctrico) debe tener un momento dipolar eléctrico permanente distinto de cero, $\mu \neq 0$. Por lo tanto, las moléculas que pertenecen a los grupos puntuales de simetría $C_{\infty v}$ y $D_{\infty h}$, es decir, las moléculas diatómicas homonucleares (e.g. H_2 , O_2) y las lineales simétricas (e.g. CO_2), así como las trompo-simétricas planas (e.g. C_6H_6) no presentan transiciones rotacionales. No obstante, las moléculas diatómicas homonucleares pueden ser detectadas a través de sus transiciones rotacionales cuadrupolares y magnéticas (e.g. Timmermann et al. 1996, Allers et al. 2005). Las moléculas trompo-esféricas pertenecen a grupos puntuales de alta simetría (T_h , O_h , I_h), es decir, que tienen más de un eje C_n de orden mayor que 2 no coincidentes. Debido precisamente a su alta simetría, suelen tener un momento dipolar $\mu \simeq 0$, y carecen también de espectro de rotación pura. Las moléculas trompo-simétricas tienen un eje de simetría C_n (con $n > 2$). Las moléculas trompo-asimétricas solo tienen ejes C_2 .

Tabla A.1: Clasificación de las moléculas en función de sus momentos de inercia.

Tipo	Momentos de Inercia	Ejemplos
Lineales	$I_A = 0, I_B = I_C$	OCS, HCN, HCO, C_2H , C_4H , HC_3N
Trompo-esféricas	$I_A = I_B = I_C$	CH_4 , SiH_4 , CH_4 , NH_4^+
Trompo-simétricas alargadas	$I_A < I_B = I_C$	CH_3CN , CH_3CCH
Trompo-simétricas achatadas	$I_A = I_B > I_C$	NH_3 , H_3O^+
Trompo-asimétricas	$I_A < I_B < I_C$	SO_2 , H_2O , H_2CO , H_2CS , H_2CCO

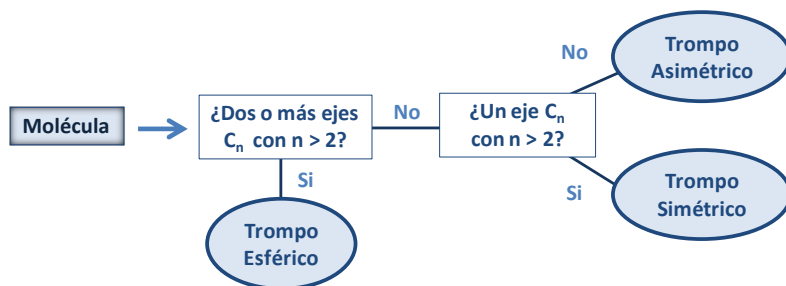


Figura A.1: Esquema de clasificación de las moléculas en trompos esféricos, simétricos y asimétricos en función de la simetría de la molécula.

A.2. Moléculas diatómicas y poliatómicas lineales

Dentro de la aproximación Born-Oppenheimer, el modelo del rotor rígido considera a los átomos como masas puntuales conectadas por enlaces rígidos. Las energías de los niveles de los estados rotacionales se obtienen resolviendo la ecuación de Schrödinger para un rotor rígido.

Para una molécula diatómica y poliatómica lineal ($I_A = 0$, $I_B = I_C$) la energía de un nivel rotacional se define como:

$$E_J = B_e J(J+1) \text{ [J]}, \quad (\text{A.1})$$

siendo J el número cuántico del momento angular rotacional ($J = 0, 1, 2$, etc.) y B_e la constante rotacional:

$$B_e = \frac{h^2}{8\pi^2 I} \text{ [J]}, \quad (\text{A.2})$$

donde I es el momento de inercia sobre el centro de masas ($I = \sum_i m_i r_i^2 = \mu R^2$), m_i la masa del átomo i a una distancia r_i del centro de masas y μ la masa reducida ($\mu = m_1 \cdot m_2 / (m_1 + m_2)$). La constante rotacional B_e (y por lo tanto E_J y ΔE_J) se puede expresar en unidades de energía ($B[\text{J}] = h^2 / 8\pi^2 I$), frecuencia ($B[\text{s}^{-1}] = h / 8\pi^2 I$) o número de onda ($B[\text{cm}^{-1}] = h / 8\pi^2 I c$).

En realidad las moléculas no se comportan exactamente como un rotor rígido sino que su distancia de enlace (d) aumenta con la energía rotacional, debido a un fenómeno conocido como distorsión centrífuga (modelo del rotor no rígido). Si la distancia de enlace aumenta, el momento de inercia también se incrementa haciendo que la energía sea

menor a la correspondiente a un rotor rígido. Para introducir esta corrección en el modelo del rotor rígido, se le resta al valor de la energía de dicho modelo una cantidad $D_e J^2 (J+1)^2$. Por lo tanto, la energía de un nivel rotacional (Ecuación A.1) teniendo en cuenta la corrección por distorsión centrífuga se calcula como:

$$E_J = B_e J(J+1) - D_e J^2 (J+1)^2 \text{ [J]}, \quad (\text{A.3})$$

siendo D_e la constante de distorsión centrífuga, $D_e = 4B_e^3 / \omega_e^2$, y ω_e la frecuencia de vibración fundamental del enlace (en cm^{-1}).

Las reglas de selección indican que las transiciones rotacionales deben cumplir $\Delta J = \pm 1$. El peso estadístico viene dado por $g_J = 2J+1$. Para estados degenerados definidos por (J, M_J) , donde $M_J = -J, -J+1, \dots, +J$, el número de estados que se encuentran en el mismo nivel es: $2J+1$. Las reglas de selección en este caso indican que $\Delta M = 0, \pm 1$.

El espectro rotacional consiste en un conjunto de líneas cada una de las cuales representa la energía necesaria para realizar un tránsito (ΔE_J). La energía necesaria para realizar un tránsito (ΔE_J) en el modelo del rotor rígido es:

$$\Delta E_J = 2B_e (J+1) \text{ [J]}, \quad (\text{A.4})$$

y ΔE_J en el modelo del rotor no rígido es:

$$\Delta E_J = 2B_e (J+1) - 4D_e (J+1)^3 \text{ [J]}. \quad (\text{A.5})$$

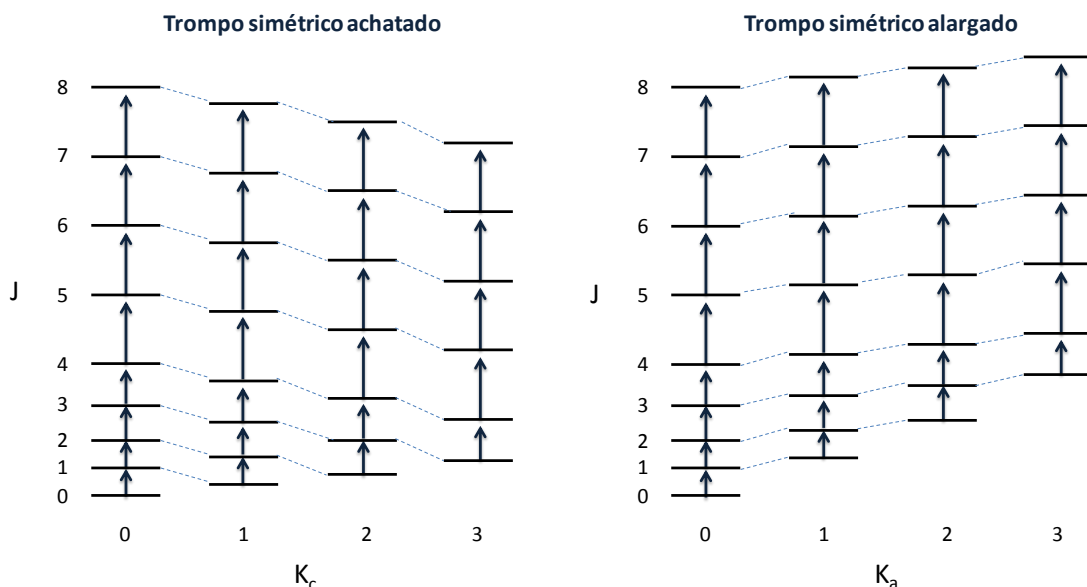


Figura A.2: Diagrama de niveles de energía de las moléculas trompo-simétricas achatadas (*izda.*) y alargadas (*dcha.*)

La constante de distorsión centrífuga es pequeña, por lo que en la Ec. A.5 el segundo término es despreciable frente al primero. En ambos modelos ΔE_J aumenta con J . Las transiciones permitidas en la molécula diatómica están regularmente espaciadas a intervalos $2B_e$. La separación entre líneas sucesivas en el modelo del rotor no rígido no es constante y disminuye ligeramente al aumentar J según la ecuación:

$$\Delta E_{J+1} - \Delta E_J = 2B_e - 4D_e[(J+2)^3 - (J+1)^3]. \quad (\text{A.6})$$

Las moléculas que contienen átomos pesados (como el CO) tienen constantes de rotación correspondientes a ~ 3 K (energía expresada en unidades de temperatura) y la transición $J = 1 \rightarrow 0$ cae dentro del rango milimétrico. En cambio, los niveles de energía rotacional de los hidruros (como el CH^+) se desplazan a energías más altas (rango submilimétrico o FIR) debido a su baja masa.

A.3. Moléculas trompo-simétricas

Las moléculas trompo-simétricas tienen dos ejes de inercia iguales y uno distinto. Pueden ser de dos tipos, las trompo-simétricas alargadas ($I_A < I_B = I_C$; prolato) y las trompo-simétricas achatadas ($I_A = I_B < I_C$; oblato). En estas moléculas, el momento dipolar está orientado a lo largo del eje de simetría de mayor orden.

El movimiento de rotación se caracteriza por dos números cuánticos: el momento angular total, J , y su proyección sobre el eje de simetría, K . Los momentos de inercia sobre el centro de masa se definen como $I_\alpha = \sum_i m_i \cdot r_{i\alpha}^2$, siendo $\alpha = A, B$ y C . Las constantes rotacionales se definen como:

$$A = \frac{h^2}{8\pi^2 I}, \quad B = \frac{h^2}{8\pi^2 I}, \quad C = \frac{h^2}{8\pi^2 I} \quad [\text{J}]. \quad (\text{A.7})$$

La energía de un nivel rotacional para una molécula trompo-simétrica alargada ($I_A < I_B = I_C$) viene dado por:

$$E_{JK} = BJ(J+1) + (A-B)K^2. \quad (\text{A.8})$$

Como $A - B > 0$, la energía de un nivel rotacional para un valor dado de J aumenta $(A-B)K^2$ veces con el valor absoluto de K . El nivel J_K tiene una degeneración $2J+1$ si $K=0$ y $2(2J+1)$ si $K \neq 0$.

La energía de un nivel rotacional para una molécula trompo-simétrica achatada ($I_A = I_B < I_C$) es:

$$E_{JK} = BJ(J+1) + (C-B)K^2. \quad (\text{A.9})$$

Como $C-B < 0$, la energía de un nivel rotacional para un valor dado de J disminuye $(C-B)K^2$ veces con el valor absoluto de K .

En la Fig. A.2 se muestra el diagrama de niveles de energía de las moléculas trompo-simétricas achatadas y alargadas. Las reglas de selección específicas para moléculas trompo-simétricas permiten transiciones rotacionales entre niveles con $\Delta J = 0$ (si $J \neq 0$), ± 1 , $\Delta K = 0$, es decir, entre los niveles J de una misma escalera K (señaladas con flechas en la Fig. A.2). El valor de K no puede ser mayor que J (es decir, $K = J, J-1, J-2, \dots, 0$). Excepto para $K = 0$, todos los estados K son doblemente degenerados, y se corresponden con direcciones opuestas de rotación alrededor del eje. Los niveles de energía se dividen en escaleras separadas con $J = K, K+1, K+2$ (líneas punteadas en la Fig. A.2). Por lo tanto, para un valor dado de K , los niveles de energía de una molécula trompo-simétrica muestran la misma estructura simple que las moléculas lineales, pero las diferentes escaleras K están desplazadas en energía por $(A-B)K^2$ en las moléculas trompo-simétricas alargadas y por $(C-B)K^2$ en las moléculas trompo-simétricas achatadas. El nivel más bajo en cada escalera K es metaestable. Para un valor dado de J , la energía de un nivel aumenta al aumentar de K en moléculas trompo-simétricas alargadas, mientras que disminuye en moléculas trompo-simétricas achatadas (Fig. A.2). Si la molécula está girando alrededor de su eje principal, K está cerca de su máximo ($K \simeq J$), y girando de extremo a extremo (*end-over-end*) cuando $K = 0$.

Como en el caso de las moléculas lineales (Sección A.2), las líneas del espectro están separadas por $2B(J+1)$, y las transiciones de todas las escaleras K se superponen (modelo del rotor rígido). Por lo tanto, la transición $J = 1 \rightarrow 0$ para $K = 0$ se produce a $\nu = 2B$, las transiciones $J = 2 \rightarrow 1$ para $K = 0$ y 1 a $\nu = 4B$ y $J = 3 \rightarrow 2$ para $K = 0, 1, 2$ a $\nu = 6B$. Sin embargo, debido a la distorsión centrífuga, las transiciones con diferentes valores de K se separan.

Igual que en el caso de moléculas diatómicas y poliatómicas lineales, las energías de cada nivel rotacional se pueden expresar teniendo en cuenta el efecto de la distorsión centrífuga:

$$E_{JK} = BJ(J+1) + (C-B)K^2 - D_J J^2(J+1)^2 - D_{JK} J(J+1)K^2 - D_K K^4 \text{ (achatado)}, \quad (\text{A.10})$$

$$E_{JK} = BJ(J+1) + (A-B)K^2 - D_J J^2(J+1)^2 - D_{JK} J(J+1)K^2 - D_K K^4 \text{ (alargado)}, \quad (\text{A.11})$$

donde D_J (asociada a la variación del momento angular total), D_K (asociada a la variación de su componente respecto al eje principal de simetría), y D_{JK} (asociada a la interacción entre ambos tipos de movimientos) son las constantes de distorsión centrífuga.

La energía necesaria para realizar un tránsito ($\Delta E(J, K)$) en una molécula trompo-simétrica alargada y achatada es:

$$\Delta E(J, K) = 2B(J+1) - 4D_J(J+1)^3 - 2D_{JK}(J+1)K^2, \quad (\text{A.12})$$

A.4. Moléculas trompo-asimétricas

Las moléculas trompo-asimétricas son aquellas que tienen los tres ejes de inercia distintos ($I_A > I_B > I_C$). No existe una fórmula general que describa los niveles de energía ya que dependen de cada transición rotacional. El espectro de rotación es más complicado ya que el número de transiciones permitidas es mayor. El momento dipolar tiene una

orientación arbitraria, aunque las reglas de selección son las mismas que para las moléculas trompo-simétricas: $\Delta J = 0$ (si $J \neq 0$), ± 1 ; $\Delta M = 0, \pm 1$. Las reglas de selección de K_a y K_c dependen de la componente del momento dipolar implicada en la transición (i.e. máximo momento dipolar en el eje a, b o c):

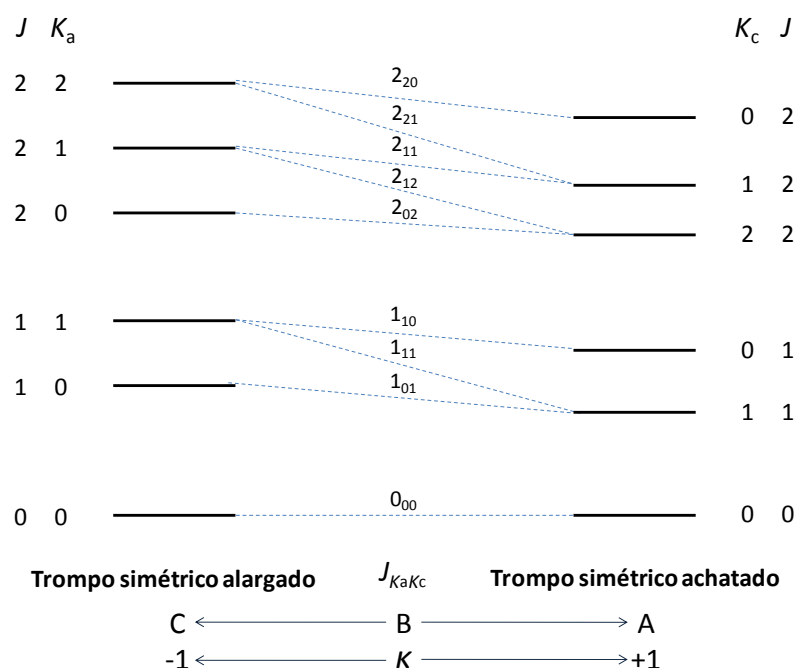


Figura A.3: Diagrama de correlación para un trompo asimétrico.

- (i) transiciones tipo a: $\Delta K_a = 0, \pm 2, \dots$ y $\Delta K_c = \pm 1, \pm 3, \dots$
- (ii) transiciones tipo b: $\Delta K_a = \pm 1, \pm 3, \dots$ y $\Delta K_c = \pm 1, \pm 3, \dots$
- (iii) transiciones tipo c: $\Delta K_a = \pm 1, \pm 3, \dots$ y $\Delta K_c = 0, \pm 2, \dots$

Una molécula trompo-asimétrica puede considerarse como un caso intermedio entre una molécula trompo-simétrica alargada ($A > B = C$) y achatada ($A = B > C$). De esta forma, los niveles se pueden representar por J_{KaKc} , donde K_a y K_c son los valores aproximados de los estados del trompo simétrico con los que se correlaciona (alargado y achatado, respectivamente). Para determinar si una molécula

$$\kappa = \frac{2B - A - C}{A - C}, \quad -1 < \kappa < 1, \quad (\text{A.13})$$

siendo A, B y C las constantes rotacionales con respecto a los ejes a, b y c , respectivamente. $\kappa = -1$ es el límite del trompo simétrico alargado, y $\kappa = +1$ el límite del trompo simétrico achatado. Por ejemplo, el formaldehído (H_2CO), con $\kappa = -0.96$, se puede aproximar a una molécula trompo-simétrica alargada.

Bibliografía específica

- Atkins, P. & de Paula, J. Physical Chemistry. 6ª edición, W. H. Freeman and Co., 1999.
- Chang, R. Basic Principles of Spectroscopy. McGraw-Hill, 1971.
- Herzberg, G. Vol. I. Molecular Spectra. D. Van Nostrand Company Inc., 1950.
- Hollas, J.M. Modern Spectroscopy, 3ª edición, John Wiley & Sons, 1996.
- Landau, L.D. & Lifshitz, E.M. Vol.3. Teoría Cuántica (teoría no-relativista). 2ª edición, Reverté.
- Lowe, J.P. & Peterson, K. Quantum Chemistry. 3ª edición, Elsevier Academic Press.
- Tielens, A. G. G. M. The Physics and Chemistry of the Interstellar Medium. Cambridge, 2005.

Apéndice B

Líneas detectadas en el barrido espectral de la Barra de Orión

Tabla B.1: Identificación de líneas

Frecuencia [MHz]	Molécula	Transición
80723.179	p-C ₃ H ₂	4 _{2,2} → 4 _{1,3}
80820.400	p-H ₂ CCO	4 _{2,3} → 3 _{2,2}
80900.320	H61γ	
81586.239	o-H ₂ CCO	4 _{1,3} → 3 _{1,2}
81881.462	HC ₃ N	9 → 8
82093.548	p-C ₃ H ₂	2 _{0,2} → 1 _{1,1}
82395.089	o-H ₂ C ₃	4 _{1,4} → 3 _{1,3}
82583.441	o-C ₃ H ₂	6 _{6,1} → 6 _{5,2}
82966.196	o-C ₃ H ₂	3 _{1,2} → 3 _{0,3}
83000.750	H71ε	
83165.345	p-H ₂ C ₃	4 _{0,4} → 3 _{0,3}
83582.470	H53β	
83624.170	C53β	
83688.092	SO ₂	8 _{1,7} → 8 _{0,8}
83801.830	H66δ	
83933.699	o-H ₂ C ₃	4 _{1,3} → 3 _{1,2}
84410.684	³⁴ SO	2 ₂ → 1 ₁
84119.329	¹³ CCH	1, 3/2, 2, 5/2 → 0, 1/2, 1, 3/2
84521.172	E-CH ₃ OH	5 ₋₁ → 4 ₀
84727.687	p-C ₃ H ₂	3 _{2,2} → 3 _{1,3}
84914.400	H60γ	
84956.760	C60γ	
85139.104	OCS	7 → 6
85162.224	HC ¹⁸ O ⁺	1 → 0
85225.608	³³ SO	2 ₂ → 1 ₁

Tabla B.1: Continuación.

Frecuencia [MHz]	Molécula	Transición
85229.326	C ¹³ CH	1, 3/2, 2, 5/2 → 0, 1/2, 1, 3/2
85272.149	c-C ₃ H	3 _{1,2} , 5/2, 3 → 3 _{1,3} , 5/2, 3
85272.522	c-C ₃ H	3 _{1,2} , 5/2, 2 → 3 _{1,3} , 5/2, 2
85338.900	o-C ₃ H ₂	2 _{1,2} → 1 _{0,1}
85347.875	HCS ⁺	2 → 1
85634.023	C ₄ H	9, 19/2 → 8, 17/2
85656.415	o-C ₃ H ₂	4 _{3,2} → 4 _{2,3}
85672.563	C ₄ H	9, 17/2 → 8, 15/2
85688.400	H42α	
85702.495	c-C ₃ H	3 _{1,2} , 7/2, 4 → 3 _{1,3} , 7/2, 4
85723.310	He42α	
85731.140	C42α	
86054.966	HC ¹⁵ N	1 → 0
86093.957	SO	2 ₂ → 1 ₁
86338.735	H ¹³ CN	1,1 → 0,1
86340.166	H ¹³ CN	1,2 → 0,1
86342.255	H ¹³ CN	1,0 → 0,1
86488.420	H70ε	
86670.760	HCO	1 _{0,1} , 3/2, 2 → 0 _{0,0} , 1/2, 1
86708.360	HCO	1 _{0,1} , 3/2, 1 → 0 _{0,0} , 1/2, 0
86754.288	H ¹³ CO ⁺	1 → 0
86777.460	HCO	1 _{0,1} , 1/2, 1 → 0 _{0,0} , 1/2, 1
86805.780	HCO	1 _{0,1} , 1/2, 0 → 0 _{0,0} , 1/2, 1
86846.986	SiO	2 → 1
87090.860	HN ¹³ C	1 → 0
87284.105	C ₂ H	1, 3/2, 1 → 0, 1/2, 1
87316.898	C ₂ H	1, 3/2, 2 → 0, 1/2, 1
87328.585	C ₂ H	1, 3/2, 1 → 0, 1/2, 0
87401.989	C ₂ H	1, 1/2, 1 → 0, 1/2, 1
87407.165	C ₂ H	1, 1/2, 0 → 0, 1/2, 1
87435.317	p-C ₃ H ₂	5 _{4,2} → 5 _{3,3}
87446.470	C ₂ H	1, 1/2, 1 → 0, 1/2, 0
87615.000	H65δ	
87925.237	HNCO	4 _{0,4} → 3 _{0,3}
88405.690	H52β	
88449.800	C52β	
88630.415	HCN	1,1 → 0,1
88631.847	HCN	1,2 → 0,1
88633.936	HCN	1,0 → 0,1
88865.702	H ¹⁵ NC	1 → 0
89188.526	HCO ⁺	1 → 0

Tabla B.1: Continuación.

Frecuencia [MHz]	Molécula	Transición
89198.550	H59 γ	
89243.050	C59 γ	
89487.391	HOC ⁺	1 \rightarrow 0
89957.849	l-C ₃ H ⁺	4 \rightarrow 3
90344.081	o-C ₃ H ₂	6 _{5,2} \rightarrow 6 _{4,3}
90663.563	HNC	1 \rightarrow 0
90925.996	¹³ C ³⁴ S	2 \rightarrow 1
90978.989	HC ₃ N	10 \rightarrow 9
91494.349	c-C ₃ H	2 _{1,2} , 5/2, 3 \rightarrow 1 _{1,1} , 3/2, 2
91497.608	c-C ₃ H	2 _{1,2} , 5/2, 2 \rightarrow 1 _{1,1} , 3/2, 1
91663.140	H64 δ	
91699.471	c-C ₃ H	2 _{1,2} , 3/2, 2 \rightarrow 1 _{1,1} , 1/2, 1
91780.518	c-C ₃ H	2 _{1,2} , 3/2, 2 \rightarrow 1 _{1,1} , 3/2, 2
91958.726	E-CH ₃ CN	5 ₄ \rightarrow 4 ₄
91971.130	A-CH ₃ CN	5 ₃ \rightarrow 4 ₃
91979.993	E-CH ₃ CN	5 ₂ \rightarrow 4 ₂
91985.313	E-CH ₃ CN	5 ₁ \rightarrow 4 ₁
91987.087	A-CH ₃ CN	5 ₀ \rightarrow 4 ₀
92034.440	H41 α	
92071.940	He41 α	
92080.350	C41 α	
92494.270	¹³ CS	2 \rightarrow 1
93171.925	N ₂ H ⁺	J, f : 1,1 \rightarrow 0,1
93173.711	N ₂ H ⁺	J, f : 1,2 \rightarrow 0,1
93176.261	N ₂ H ⁺	J, f : 1,0 \rightarrow 0,1
93580.909	A-CH ₃ CHO	5 _{1,5} \rightarrow 4 _{1,4}
93595.235	E-CH ₃ CHO	5 _{1,5} \rightarrow 4 _{1,4}
93607.320	H51 β	
93645.470	He51 β	
93654.020	C51 β	
93775.880	H58 γ	
93822.660	C58 γ	
94072.820	H68 ϵ	
95150.402	C ₄ H	10, 21/2 \rightarrow 9, 19/2
95169.391	A-CH ₃ OH	8 ₀ \rightarrow 7 ₁
95188.935	C ₄ H	10, 19/2 \rightarrow 9, 17/2
95914.310	A-CH ₃ OH	2 ₁ \rightarrow 1 ₁
95947.437	E-CH ₃ CHO	5 _{0,5} \rightarrow 4 _{0,4}
95963.459	A-CH ₃ CHO	5 _{0,5} \rightarrow 4 _{0,4}
95964.630	H63 δ	
96412.952	C ³⁴ S	2 \rightarrow 1

Tabla B.1: Continuación.

Frecuencia [MHz]	Molécula	Transición
96739.358	E-CH ₃ OH	$2_{-1} \rightarrow 1_{-1}$
96741.371	A-CH ₃ OH	$2_0 \rightarrow 1_0$
96744.545	E-CH ₃ OH	$2_0 \rightarrow 1_0$
96755.501	E-CH ₃ OH	$2_1 \rightarrow 1_1$
96781.825	³⁴ SO	$5_4 \rightarrow 4_4$
97172.064	C ³³ S	$2 \rightarrow 1$
97301.208	OCS	$8 \rightarrow 7$
97582.798	A-CH ₃ OH	$2_{-1} \rightarrow 1_{-1}$
97715.405	³⁴ SO	$2_3 \rightarrow 1_2$
97980.953	CS	$2 \rightarrow 1$
97995.166	<i>l</i> -C ₃ H	$^2\Pi_{1/2}, 9/2^+, 5 \rightarrow 7/2^-, 4$
97995.913	<i>l</i> -C ₃ H	$^2\Pi_{1/2}, 9/2^+, 4 \rightarrow 7/2^-, 3$
98011.611	<i>l</i> -C ₃ H	$^2\Pi_{1/2}, 9/2^-, 5 \rightarrow 7/2^+, 4$
98012.524	<i>l</i> -C ₃ H	$^2\Pi_{1/2}, 9/2^-, 4 \rightarrow 7/2^+, 3$
98199.390	H67ε	
98483.143	³³ SO	$2_3 \rightarrow 1_2$
98671.900	H57γ	
98863.314	E-CH ₃ CHO	$5_{1,4} \rightarrow 4_{1,3}$
98900.944	A-CH ₃ CHO	$5_{1,4} \rightarrow 4_{1,3}$
99022.960	H40α	
99072.360	C40α	
99225.210	H50β	
99274.720	C50β	
99299.886	SO	$2_3 \rightarrow 1_2$
100029.550	SO	$5_4 \rightarrow 4_4$
100076.385	HC ₃ N	$11 \rightarrow 10$
100094.511	o-H ₂ CCO	$5_{1,5} \rightarrow 4_{1,4}$
100539.630	H62δ	
101002.349	o-H ₂ CCO	$5_{3,3} \rightarrow 4_{3,2}$
101002.354	o-H ₂ CCO	$5_{3,2} \rightarrow 4_{3,1}$
101024.430	p-H ₂ CCO	$5_{2,4} \rightarrow 4_{2,3}$
101477.810	o-H ₂ CS	$3_{1,3} \rightarrow 2_{1,2}$
101981.442	o-H ₂ CCO	$5_{1,4} \rightarrow 4_{1,3}$
102571.000	H66ε	
102587.532	CF ⁺	$1 \rightarrow 0$
102992.379	o-H ₂ C ₃	$5_{1,5} \rightarrow 4_{1,4}$
103039.907	p-H ₂ CS	$3_{2,2} \rightarrow 2_{2,1}$
103040.452	p-H ₂ CS	$3_{0,3} \rightarrow 2_{0,2}$
103051.847	p-H ₂ CS	$3_{2,1} \rightarrow 2_{2,0}$
103319.276	<i>l</i> -C ₃ H	$^2\Pi_{3/2}, 9/2^-, 5 \rightarrow 7/2^+, 4$
103319.786	<i>l</i> -C ₃ H	$^2\Pi_{3/2}, 9/2^-, 4 \rightarrow 7/2^+, 3$

Tabla B.1: Continuación.

Frecuencia [MHz]	Molécula	Transición
103372.483	<i>l</i> -C ₃ H	$^2\Pi_{3/2}, 9/2^+, 5 \rightarrow 7/2^-, 4$
103373.094	<i>l</i> -C ₃ H	$^2\Pi_{3/2}, 9/2^+, 4 \rightarrow 7/2^-, 3$
103914.840	H56 γ	
103952.926	p-H ₂ C ₃	$5_{0,5} \rightarrow 4_{0,4}$
103966.690	C56 γ	
104029.420	SO ₂	$3_{1,3} \rightarrow 2_{0,2}$
104239.299	SO ₂	$10_{1,9} \rightarrow 10_{0,10}$
104617.040	o-H ₂ CS	$3_{1,2} \rightarrow 2_{1,1}$
104666.575	C ₄ H	$11, 23/2 \rightarrow 10, 21/2$
104705.099	C ₄ H	$11, 21/2 \rightarrow 10, 19/2$
104711.396	¹³ C ¹⁸ O	$1 \rightarrow 0$
104915.583	o-H ₂ C ₃	$5_{1,4} \rightarrow 4_{1,3}$
105301.860	H49 β	
105344.770	He49 β	
105354.400	C49 β	
105410.220	H61 δ	
105794.062	CH ₂ NH	$4_{0,4} \rightarrow 3_{1,3}$
106737.360	H39 α	
106780.860	He39 α	
106790.610	C39 α	
107013.831	A-CH ₃ OH	$3_1 \rightarrow 4_0$
107206.110	H65 ϵ	
107956.681	³³ SO	$3_2 \rightarrow 2_1$
108426.889	¹³ CN	$1, 1/2, 0, 1 \rightarrow 0, 1/2, 1, 2$
108631.121	¹³ CN	$1, 1/2, 1, 0 \rightarrow 0, 1/2, 0, 1$
108636.923	¹³ CN	$1, 1/2, 1, 1 \rightarrow 0, 1/2, 0, 1$
108638.212	¹³ CN	$1, 3/2, 1, 1 \rightarrow 0, 1/2, 1, 0$
108643.590	¹³ CN	$1, 3/2, 1, 2 \rightarrow 0, 1/2, 1, 1$
108644.346	¹³ CN	$1, 3/2, 1, 0 \rightarrow 0, 1/2, 1, 1$
108645.064	¹³ CN	$1, 3/2, 1, 1 \rightarrow 0, 1/2, 1, 1$
108651.297	¹³ CN	$1, 1/2, 1, 2 \rightarrow 0, 1/2, 0, 1$
108657.646	¹³ CN	$1, 3/2, 1, 2 \rightarrow 0, 1/2, 1, 2$
108658.948	¹³ CN	$1, 3/2, 1, 1 \rightarrow 0, 1/2, 1, 2$
108780.201	¹³ CN	$1, 3/2, 2, 3 \rightarrow 0, 1/2, 1, 2$
108782.374	¹³ CN	$1, 3/2, 2, 2 \rightarrow 0, 1/2, 1, 1$
108786.982	¹³ CN	$1, 3/2, 2, 1 \rightarrow 0, 1/2, 1, 0$
108793.753	¹³ CN	$1, 3/2, 2, 1 \rightarrow 0, 1/2, 1, 1$
108893.945	E-CH ₃ OH	$0_0 \rightarrow 1_{-1}$
109173.637	HC ₃ N	$12 \rightarrow 11$
109217.567	¹³ CN	$1, 3/2, 1, 2 \rightarrow 0, 1/2, 0, 1$
109252.181	SO	$3_2 \rightarrow 2_1$

Tabla B.1: Continuación.

Frecuencia [MHz]	Molécula	Transición
109463.063	OCS	$9 \rightarrow 8$
109536.010	H55 γ	
109590.650	C55 γ	
109689.610	C ¹⁵ N	$1,1/2,1 \rightarrow 0,1/2,1$
109782.176	C ¹⁸ O	$1 \rightarrow 0$
109905.749	HNCO	$5_{0,5} \rightarrow 4_{0,4}$
110023.540	C ¹⁵ N	$1,3/2,1 \rightarrow 0,1/2,0$
110024.590	C ¹⁵ N	$1,3/2,2 \rightarrow 0,1/2,1$
110201.354	¹³ CO	$1 \rightarrow 0$
110364.353	A-CH ₃ CN	$6_3 \rightarrow 5_3$
110374.988	E-CH ₃ CN	$6_2 \rightarrow 5_2$
110381.371	E-CH ₃ CN	$6_1 \rightarrow 5_1$
110383.499	A-CH ₃ CN	$6_0 \rightarrow 5_0$
110600.680	H60 δ	
111885.080	H48 β	
111930.670	He48 β	
111940.890	C48 β	
112124.910	H64 ϵ	
112248.716	A-CH ₃ CHO	$6_{1,6} \rightarrow 5_{1,5}$
112254.508	E-CH ₃ CHO	$6_{1,6} \rightarrow 5_{1,5}$
112358.795	C ¹⁷ O	$1,3/2 \rightarrow 0,5/2$
112358.992	C ¹⁷ O	$1,7/2 \rightarrow 0,5/2$
112360.001	C ¹⁷ O	$1,5/2 \rightarrow 0,5/2$
112445.713	l-C ₃ H ⁺	$5 \rightarrow 4$
112490.768	o-C ₃ H ₂	$7_{4,3} \rightarrow 7_{3,4}$
113123.370	CN	$1,1/2,1/2 \rightarrow 0,1/2,1/2$
113144.157	CN	$1,1/2,1/2 \rightarrow 0,1/2,3/2$
113170.492	CN	$1,1/2,3/2 \rightarrow 0,1/2,1/2$
113191.279	CN	$1,1/2,3/2 \rightarrow 0,1/2,3/2$
113488.120	CN	$1,3/2,3/2 \rightarrow 0,1/2,1/2$
113490.970	CN	$1,3/2,5/2 \rightarrow 0,1/2,3/2$
113499.644	CN	$1,3/2,1/2 \rightarrow 0,1/2,1/2$
113508.907	CN	$1,3/2,3/2 \rightarrow 0,1/2,3/2$
113520.432	CN	$1,3/2,1/2 \rightarrow 0,1/2,3/2$
114182.520	C ₄ H	$12, 25/2 \rightarrow 11, 23/2$
114221.035	C ₄ H	$12, 23/2 \rightarrow 11, 21/2$
114940.175	E-CH ₃ CHO	$6_{0,6} \rightarrow 5_{0,5}$
114959.902	A-CH ₃ CHO	$6_{0,6} \rightarrow 5_{0,5}$
115153.935	NS	$^2\Pi_{1/2}, 5/2^+, 7/2 \rightarrow 3/2^-, 5/2$
115156.812	NS	$^2\Pi_{1/2}, 5/2^+, 5/2 \rightarrow 3/2^-, 3/2$
115162.982	NS	$^2\Pi_{1/2}, 5/2^+, 3/2 \rightarrow 3/2^-, 1/2$

Tabla B.1: Continuación.

Frecuencia [MHz]	Molécula	Transición
115271.202	CO	$1 \rightarrow 0$
115274.410	H38 α	
115331.910	C38 α	
115556.253	NS	$^2\Pi_{1/2}, 5/2^-, 7/2 \rightarrow 3/2^+, 5/2$
115570.763	NS	$^2\Pi_{1/2}, 5/2^-, 5/2 \rightarrow 3/2^+, 3/2$
115571.954	NS	$^2\Pi_{1/2}, 5/2^-, 3/2 \rightarrow 3/2^+, 1/2$
115804.405	SO ⁺	$^2\Pi_{1/2}, 5/2^+ \rightarrow 3/2^-$
116179.947	SO ⁺	$^2\Pi_{1/2}, 5/2^- \rightarrow 3/2^+$
116980.450	SO ₂	$8_{0,8} \rightarrow 7_{1,7}$
117151.183	o-C ₃ H ₂	$3_{0,3} \rightarrow 2_{1,2}$
117546.231	p-C ₃ H ₂	$3_{1,3} \rightarrow 2_{0,2}$
128020.522	HCS ⁺	$3 \rightarrow 2$
128372.260	H57 δ	
128605.111	SO ₂	$12_{2,10} \rightarrow 12_{1,11}$
128739.669	E-CH ₃ CN	$7_4 \rightarrow 6_4$
128757.029	A-CH ₃ CN	$7_3 \rightarrow 6_3$
128769.435	E-CH ₃ CN	$7_2 \rightarrow 6_2$
128776.880	E-CH ₃ CN	$7_1 \rightarrow 6_1$
128779.363	A-CH ₃ CN	$7_0 \rightarrow 6_0$
128814.500	H61 ϵ	
129036.190	H52 γ	
129138.901	SO	$3_3 \rightarrow 2_2$
129514.799	SO ₂	$10_{2,8} \rightarrow 10_{1,9}$
130268.687	SiO	$3 \rightarrow 2$
130891.821	A-CH ₃ CHO	$7_{1,7} \rightarrow 6_{1,6}$
130892.749	E-CH ₃ CHO	$7_{1,7} \rightarrow 6_{1,6}$
131014.841	SO ₂	$12_{1,11} \rightarrow 12_{0,12}$
132890.759	E-CH ₃ OH	$6_{-1} \rightarrow 5_0$
132993.978	c-C ₃ H	$3_{1,3}, 7/2, 4 \rightarrow 2_{1,2}, 5/2, 3$
132994.679	c-C ₃ H	$3_{1,3}, 7/2, 3 \rightarrow 2_{1,2}, 5/2, 2$
133186.451	c-C ₃ H	$3_{1,3}, 5/2, 2 \rightarrow 2_{1,2}, 3/2, 1$
133187.717	c-C ₃ H	$3_{1,3}, 5/2, 3 \rightarrow 2_{1,2}, 3/2, 2$
133213.644	C ₄ H	$14, 29/2 \rightarrow 13, 27/2$
133252.140	C ₄ H	$14, 27/2 \rightarrow 13, 25/2$
133785.898	OCS	$11 \rightarrow 10$
134004.812	SO ₂	$8_{2,6} \rightarrow 8_{1,7}$
134932.733	l-C ₃ H ⁺	$6 \rightarrow 5$
135110.590	H60 ϵ	
135138.160	H56 δ	
135249.500	H45 β	
135286.040	H36 α	

Tabla B.1: Continuación.

Frecuencia [MHz]	Molécula	Transición
135353.530	C36 α	
135696.017	SO ₂	5 _{1,5} \rightarrow 4 _{0,4}
135775.651	³⁴ SO	3 ₄ \rightarrow 2 ₃
136464.402	HC ₃ N	15 \rightarrow 14
136559.290	H51 γ	
136634.660	SO	6 ₅ \rightarrow 5 ₅
137371.210	p-H ₂ CS	4 _{0,4} \rightarrow 3 _{0,3}
137449.954	o-H ₂ ¹³ CO	2 _{1,2} \rightarrow 1 _{1,1}
138178.654	SO	3 ₄ \rightarrow 2 ₃
138319.628	A-CH ₃ CHO	7 _{1,6} \rightarrow 6 _{1,5}
138739.264	¹³ CS	3 \rightarrow 2
139483.682	o-H ₂ CS	4 _{1,3} \rightarrow 3 _{1,2}
140127.471	o-H ₂ CCO	7 _{1,7} \rightarrow 6 _{1,6}
140306.166	SO ₂	6 _{2,4} \rightarrow 6 _{1,5}
140839.516	o-H ₂ CO	2 _{1,2} \rightarrow 1 _{1,1}
141402.460	o-H ₂ CCO	7 _{3,5} \rightarrow 6 _{3,4}
141402.491	o-H ₂ CCO	7 _{3,4} \rightarrow 6 _{3,3}
141635.793	<i>l</i> -C ₃ H	² $\Pi_{3/2}$, 13/2 ⁺ , 7 \rightarrow 11/2 ⁻ , 6
141636.431	<i>l</i> -C ₃ H	² $\Pi_{3/2}$, 13/2 ⁺ , 6 \rightarrow 11/2 ⁻ , 5
141708.728	<i>l</i> -C ₃ H	² $\Pi_{3/2}$, 13/2 ⁻ , 7 \rightarrow 11/2 ⁺ , 6
141709.494	<i>l</i> -C ₃ H	² $\Pi_{3/2}$, 13/2 ⁻ , 6 \rightarrow 11/2 ⁺ , 5
141824.000	H59 ϵ	
142388.210	H55 δ	
142728.783	C ₄ H	15, 31/2 \rightarrow 14, 29/2
142767.267	C ₄ H	15, 29/2 \rightarrow 14, 27/2
143057.080	SO ₂	16 _{2,14} \rightarrow 16 _{1,15}
143865.795	A-CH ₃ OH	3 ₁ \rightarrow 2 ₁
144183.804	o-H ₂ C ₃	7 _{1,7} \rightarrow 6 _{1,6}
144474.120	H44 β	
144546.200	C44 β	
144617.101	C ³⁴ S	3 \rightarrow 2
144678.940	H50 γ	
144828.001	DCN	2 \rightarrow 1
145089.611	o-C ₃ H ₂	3 _{1,2} \rightarrow 2 _{2,1}
145097.435	E-CH ₃ OH	3 ₋₁ \rightarrow 2 ₋₁
145103.185	A-CH ₃ OH	3 ₀ \rightarrow 2 ₀
145124.332	A-CH ₃ OH	3 ₋₂ \rightarrow 2 ₋₂
145126.191	E-CH ₃ OH	3 ₂ \rightarrow 2 ₂
145126.386	E-CH ₃ OH	3 ₋₂ \rightarrow 2 ₋₂
145131.864	E-CH ₃ OH	3 ₁ \rightarrow 2 ₁
145133.415	A-CH ₃ OH	3 ₂ \rightarrow 2 ₂

Tabla B.1: Continuación.

Frecuencia [MHz]	Molécula	Transición
145560.949	HC ₃ N	16 → 15
145602.951	p-H ₂ CO	2 _{0,2} → 1 _{0,1}
145755.731	C ³³ S	3 → 2
146368.328	A-CH ₃ OH	3 ₋₁ → 2 ₋₁
146605.520	SO ₂	4 _{2,2} → 4 _{1,3}
146618.697	A-CH ₃ OH	9 ₀ → 8 ₁
146635.669	o-H ₂ ¹³ CO	2 _{1,1} → 1 _{1,0}
146876.061	o-H ₂ C ₃	7 _{1,6} → 6 _{1,5}
146969.026	CS	3 → 2
147046.890	H35α	
147120.250	C35α	
147149.068	A-CH ₃ CN	8 ₃ → 7 ₃
147163.243	E-CH ₃ CN	8 ₂ → 7 ₂
147171.751	E-CH ₃ CN	8 ₁ → 7 ₁
147174.587	A-CH ₃ CN	8 ₀ → 7 ₀
148989.910	H58ε	
149106.972	<i>l</i> -C ₃ H	² Π _{1/2} , 13/2 ⁻ , 6 → 11/2 ⁺ , 5
149106.972	<i>l</i> -C ₃ H	² Π _{1/2} , 13/2 ⁻ , 7 → 11/2 ⁺ , 6
149212.667	<i>l</i> -C ₃ H	² Π _{1/2} , 13/2 ⁺ , 7 → 11/2 ⁻ , 6
149212.667	<i>l</i> -C ₃ H	² Π _{1/2} , 13/2 ⁺ , 6 → 11/2 ⁻ , 5
149505.128	E-CH ₃ CHO	8 _{1,8} → 7 _{1,7}
149507.462	A-CH ₃ CHO	8 _{1,8} → 7 _{1,7}
150166.510	H54δ	
150176.457	NO	² Π _{1/2} , (3/2 ⁻ , 5/2) → (1/2 ⁺ , 3/2)
150436.558	p-C ₃ H ₂	2 _{2,0} → 1 _{1,1}
150498.335	o-H ₂ CO	2 _{1,1} → 1 _{1,0}
150546.462	NO	² Π _{1/2} , (3/2 ⁺ , 5/2) → (1/2 ⁻ , 3/2)
150820.665	p-C ₃ H ₂	4 _{0,4} → 3 _{1,3}
150851.898	o-C ₃ H ₂	4 _{1,4} → 3 _{0,3}
150954.689	p-C ₃ H ₂	6 _{2,4} → 6 _{1,5}
151039.149	o-C ₃ H ₂	6 _{3,4} → 6 _{2,5}
151343.875	o-C ₃ H ₂	5 _{1,4} → 5 _{0,5}
151361.102	p-C ₃ H ₂	5 _{2,4} → 5 _{1,5}
151378.663	SO ₂	2 _{2,0} → 2 _{1,1}
152243.611	C ₄ H	16, 33/2 → 15, 31/2
152282.083	C ₄ H	16, 31/2 → 15, 29/2
152607.614	E-CH ₃ CHO	8 _{0,8} → 7 _{0,7}
153455.460	H49γ	
153865.086	HNCO	7 _{0,7} → 6 _{0,6}
154557.220	H43β	
154657.288	HC ₃ N	17 → 16

Tabla B.1: Continuación.

Frecuencia [MHz]	Molécula	Transición
155506.801	^{34}SO	$4_3 \rightarrow 3_2$
155518.308	p-C ₃ H ₂	$3_{2,2} \rightarrow 2_{1,1}$
156127.544	A-CH ₃ OH	$6_2 \rightarrow 7_1$
156602.395	A-CH ₃ OH	$2_1 \rightarrow 3_0$
156647.130	H57 ϵ	
156828.517	E-CH ₃ OH	$7_0 \rightarrow 7_{-1}$
157048.617	E-CH ₃ OH	$6_0 \rightarrow 6_{-1}$
157270.832	E-CH ₃ OH	$1_0 \rightarrow 1_{-1}$
157272.338	E-CH ₃ OH	$3_0 \rightarrow 3_{-1}$
157276.019	E-CH ₃ OH	$2_0 \rightarrow 2_{-1}$
157418.719	l-C ₃ H ⁺	$7 \rightarrow 6$
157937.697	E-CH ₃ CHO	$8_{1,7} \rightarrow 7_{1,6}$
157974.590	A-CH ₃ CHO	$8_{1,7} \rightarrow 7_{1,6}$
158107.358	OCS	$13 \rightarrow 12$
158199.781	SO ₂	$3_{2,2} \rightarrow 3_{1,3}$
158522.090	H53 δ	
158971.811	SO	$4_3 \rightarrow 3_2$
160211.520	H34 α	
160827.841	SO ₂	$10_{0,10} \rightarrow 9_{1,9}$
161297.246	NS	$^2\Pi_{1/2}, 7/2^-, 9/2 \rightarrow 5/2^+, 7/2$
161298.411	NS	$^2\Pi_{1/2}, 7/2^-, 7/2 \rightarrow 5/2^+, 5/2$
161301.747	NS	$^2\Pi_{1/2}, 7/2^-, 5/2 \rightarrow 5/2^+, 3/2$
161697.257	NS	$^2\Pi_{1/2}, 7/2^+, 9/2 \rightarrow 5/2^-, 7/2$
161703.404	NS	$^2\Pi_{1/2}, 7/2^+, 7/2 \rightarrow 5/2^-, 5/2$
161703.987	NS	$^2\Pi_{1/2}, 7/2^+, 5/2 \rightarrow 5/2^-, 3/2$
161758.109	C ₄ H	$17, 35/2 \rightarrow 16, 33/2$
161796.568	C ₄ H	$17, 33/2 \rightarrow 16, 31/2$
162198.598	SO ⁺	$^2\Pi_{1/2}, 7/2^- \rightarrow 5/2^+$
162574.058	SO ⁺	$^2\Pi_{1/2}, 7/2^+ \rightarrow 5/2^-$
162956.690	H48 γ	
163160.893	o-H ₂ CCO	$8_{1,7} \rightarrow 7_{1,6}$
163491.035	l-C ₃ H	$^2\Pi_{3/2}, 15/2^-, 8 \rightarrow 13/2^+, 7$
163491.557	l-C ₃ H	$^2\Pi_{3/2}, 15/2^-, 7 \rightarrow 13/2^+, 6$
163597.232	l-C ₃ H	$^2\Pi_{3/2}, 15/2^+, 8 \rightarrow 13/2^-, 7$
163597.900	l-C ₃ H	$^2\Pi_{3/2}, 15/2^+, 7 \rightarrow 13/2^-, 6$
163605.533	SO ₂	$14_{1,13} \rightarrow 14_{0,14}$
163753.404	HC ₃ N	$18 \rightarrow 17$
164777.547	o-H ₂ C ₃	$8_{1,8} \rightarrow 7_{1,7}$
164838.520	H56 ϵ	
165050.175	E-CH ₃ OH	$1_1 \rightarrow 1_0$
165061.130	E-CH ₃ OH	$2_1 \rightarrow 2_0$

Tabla B.1: Continuación.

Frecuencia [MHz]	Molécula	Transición
165099.240	E-CH ₃ OH	3 ₁ → 3 ₀
165144.652	SO ₂	5 _{2,4} → 5 _{1,5}
165190.475	E-CH ₃ OH	4 ₁ → 4 ₀
165225.452	SO ₂	7 _{1,7} → 6 _{0,6}
165369.341	E-CH ₃ OH	5 ₁ → 5 ₀
165518.064	E-CH ₃ CN	9 ₄ → 8 ₄
165540.376	A-CH ₃ CN	9 ₃ → 8 ₃
165556.321	E-CH ₃ CN	9 ₂ → 8 ₂
165565.890	E-CH ₃ CN	9 ₁ → 8 ₁
165569.080	A-CH ₃ CN	9 ₀ → 8 ₀
165601.050	H42β	
165678.649	E-CH ₃ OH	6 ₁ → 6 ₀
166169.098	E-CH ₃ OH	7 ₁ → 7 ₀
167509.550	H52δ	
167854.234	o-H ₂ C ₃	8 _{1,7} → 7 _{1,6}
167910.516	o-H ₂ ³⁴ S	1 _{1,0} → 1 _{0,1}
168088.618	E-CH ₃ CHO	9 _{1,9} → 8 _{1,8}
168093.444	A-CH ₃ CHO	9 _{1,9} → 8 _{1,8}
168762.753	o-H ₂ S	1 _{1,0} → 1 _{0,1}
168815.110	³⁴ SO	4 ₄ → 3 ₃
169114.079	o-H ₂ CS	5 _{1,5} → 4 _{1,4}
170060.592	E-CH ₃ OH	3 ₂ → 2 ₁
170322.627	HC ¹⁸ O ⁺	2 → 1
170691.620	HCS ⁺	4 → 3
171272.255	C ₄ H	18, 37/2 → 17, 35/2
171296.985	A-CH ₃ CHO	9 _{0,9} → 8 _{0,8}
171310.702	C ₄ H	18, 35/2 → 17, 33/2
171688.117	p-H ₂ CS	5 _{0,5} → 4 _{0,4}
171958.650	<i>l</i> -C ₃ H	² Π _{1/2} , 15/2 ⁺ , 7 → 13/2 ⁻ , 6
171958.650	<i>l</i> -C ₃ H	² Π _{1/2} , 15/2 ⁺ , 8 → 13/2 ⁻ , 7
172094.778	<i>l</i> -C ₃ H	² Π _{1/2} , 15/2 ⁻ , 7 → 13/2 ⁺ , 6
172094.778	<i>l</i> -C ₃ H	² Π _{1/2} , 15/2 ⁻ , 8 → 13/2 ⁺ , 7
172107.957	HC ¹⁵ N	2 → 1
172181.403	SO	4 ₄ → 3 ₃
172463.355	c-C ₃ H	4 _{1,4} , 9/2, 5 → 3 _{1,3} , 7/2, 4
172463.718	c-C ₃ H	4 _{1,4} , 9/2, 4 → 3 _{1,3} , 7/2, 3
172660.964	c-C ₃ H	4 _{1,4} , 7/2, 3 → 3 _{1,3} , 5/2, 2
172661.526	c-C ₃ H	4 _{1,4} , 7/2, 4 → 3 _{1,3} , 5/2, 3
172677.851	H ¹³ CN	2 → 1
172849.285	HC ₃ N	19 → 18
173259.010	H47γ	

Tabla B.1: Continuación.

Frecuencia [MHz]	Molécula	Transición
173377.377	HCO	$2_{0,2}, 5/2, 3 \rightarrow 1_{0,1}, 3/2, 2$
173406.082	HCO	$2_{0,2}, 5/2, 2 \rightarrow 1_{0,1}, 3/2, 1$
173443.065	HCO	$2_{0,2}, 3/2, 2 \rightarrow 1_{0,1}, 1/2, 1$
173474.400	HCO	$2_{0,2}, 3/2, 1 \rightarrow 1_{0,1}, 1/2, 0$
173506.695	H^{13}CO^+	$2 \rightarrow 1$
173688.237	SiO	$4 \rightarrow 3$
174345.223	o-H ₂ CS	$5_{1,4} \rightarrow 4_{1,3}$
174634.861	C ₂ H	$2, 5/2, 2 \rightarrow 1, 3/2, 2$
174663.199	C ₂ H	$2, 5/2, 3 \rightarrow 1, 3/2, 2$
174667.629	C ₂ H	$2, 5/2, 2 \rightarrow 1, 3/2, 1$
174721.744	C ₂ H	$2, 3/2, 2 \rightarrow 1, 1/2, 1$
174728.071	C ₂ H	$2, 3/2, 1 \rightarrow 1, 1/2, 0$
174733.210	C ₂ H	$2, 3/2, 1 \rightarrow 1, 1/2, 1$
174806.843	C ₂ H	$2, 3/2, 2 \rightarrow 1, 3/2, 2$
174928.886	SO	$7_6 \rightarrow 6_6$
175275.722	SO ₂	$7_{2,6} \rightarrow 7_{1,7}$
175352.753	³⁴ SO	$4_5 \rightarrow 3_4$
202320.442	A-CH ₃ CN	$11_3 \rightarrow 10_3$
202339.920	E-CH ₃ CN	$11_2 \rightarrow 10_2$
202351.610	E-CH ₃ CN	$11_1 \rightarrow 10_1$
202355.507	A-CH ₃ CN	$11_0 \rightarrow 10_0$
202386.776	l-C ₃ H ⁺	$9 \rightarrow 8$
202924.054	o-H ₂ CS	$6_{1,6} \rightarrow 5_{1,5}$
203391.484	SO ₂	$12_{0,12} \rightarrow 11_{1,11}$
204788.929	p-C ₃ H ₂	$4_{2,2} \rightarrow 3_{2,1}$
205161.898	E-CH ₃ CHO	$11_{1,11} \rightarrow 10_{1,10}$
205170.506	CF ⁺	$2 \rightarrow 1$
205170.686	A-CH ₃ CHO	$11_{1,11} \rightarrow 10_{1,10}$
205300.539	SO ₂	$11_{2,10} \rightarrow 11_{1,11}$
205791.270	A-CH ₃ OH	$1_1 \rightarrow 2_0$
205960.125	o-H ₂ C ₃	$10_{1,10} \rightarrow 9_{1,9}$
205987.858	p-H ₂ CS	$6_{0,6} \rightarrow 5_{0,5}$
206052.602	o-H ₂ CS	$6_{3,4} \rightarrow 5_{3,3}$
206052.602	o-H ₂ CS	$6_{3,3} \rightarrow 5_{3,2}$
206131.619	o-H ₂ ¹³ CO	$3_{1,3} \rightarrow 2_{1,2}$
206158.602	p-H ₂ CS	$6_{2,4} \rightarrow 5_{2,3}$
206176.013	SO	$5_4 \rightarrow 4_3$
206745.155	OCS	$17 \rightarrow 16$
207279.369	l-C ₃ H	$^2\Pi_{3/2}, 19/2^-, 10 \rightarrow 17/2^+, 9$
207279.779	l-C ₃ H	$^2\Pi_{3/2}, 19/2^-, 9 \rightarrow 17/2^+, 8$
207436.051	NS	$^2\Pi_{1/2}, 9/2^+, 11/2 \rightarrow 7/2^-, 9/2$

Tabla B.1: Continuación.

Frecuencia [MHz]	Molécula	Transición
207436.636	NS	$^2\Pi_{1/2}, 9/2^+, 9/2 \rightarrow 7/2^-, 7/2$
207438.692	NS	$^2\Pi_{1/2}, 9/2^+, 7/2 \rightarrow 7/2^-, 5/2$
207459.226	<i>l</i> -C ₃ H	$^2\Pi_{3/2}, 19/2^+, 10 \rightarrow 17/2^-, 9$
207459.800	<i>l</i> -C ₃ H	$^2\Pi_{3/2}, 19/2^+, 9 \rightarrow 17/2^-, 8$
207834.866	NS	$^2\Pi_{1/2}, 9/2^-, 11/2 \rightarrow 7/2^+, 9/2$
207838.365	NS	$^2\Pi_{1/2}, 9/2^-, 9/2 \rightarrow 7/2^+, 7/2$
207838.365	NS	$^2\Pi_{1/2}, 9/2^-, 7/2 \rightarrow 7/2^+, 5/2$
207843.289	p-H ₂ C ₃	$10_{0,10} \rightarrow 9_{0,9}$
208267.045	A-CH ₃ CHO	$11_{0,11} \rightarrow 10_{0,10}$
208590.016	SO ⁺	$^2\Pi_{1/2}, 9/2^+ \rightarrow 7/2^-$
208700.337	SO ₂	$3_{2,2} \rightarrow 2_{1,1}$
208965.420	SO ⁺	$^2\Pi_{1/2}, 9/2^- \rightarrow 7/2^+$
209200.620	o-H ₂ CS	$6_{1,5} \rightarrow 5_{1,4}$
209230.199	HC ₃ N	$23 \rightarrow 22$
209324.922	C ₄ H	$22, 45/2 \rightarrow 21, 43/2$
209363.306	C ₄ H	$22, 43/2 \rightarrow 21, 41/2$
209419.159	¹³ C ¹⁸ O	$2 \rightarrow 1$
209805.427	o-H ₂ C ₃	$10_{1,9} \rightarrow 9_{1,8}$
211013.020	³⁴ SO	$5_5 \rightarrow 4_4$
211117.576	c-C ₃ H	$5_{1,5}, 11/2, 6 \rightarrow 4_{1,4}, 9/2, 5$
211117.834	c-C ₃ H	$5_{1,5}, 11/2, 5 \rightarrow 4_{1,4}, 9/2, 4$
211211.449	o-H ₂ CO	$3_{1,3} \rightarrow 2_{1,2}$
211318.450	c-C ₃ H	$5_{1,5}, 9/2, 4 \rightarrow 4_{1,4}, 7/2, 3$
211318.796	c-C ₃ H	$5_{1,5}, 9/2, 5 \rightarrow 4_{1,4}, 7/2, 4$
212811.190	p-H ₂ ¹³ CO	$3_{0,3} \rightarrow 2_{0,2}$
213360.654	HCS ⁺	$5 \rightarrow 4$
214574.080	¹³ C ¹⁷ O	$2 \rightarrow 1$
215220.650	SO	$5_5 \rightarrow 4_4$
215839.917	³⁴ SO	$5_6 \rightarrow 4_5$
216112.580	DCO ⁺	$3 \rightarrow 2$
216278.738	o-C ₃ H ₂	$3_{3,0} \rightarrow 2_{2,1}$
216488.286	c-C ₃ H	$4_{1,3}, 9/2, 5 \rightarrow 3_{1,2}, 7/2, 4$
216492.634	c-C ₃ H	$4_{1,3}, 9/2, 4 \rightarrow 3_{1,2}, 7/2, 3$
216581.930	E-CH ₃ CHO	$11_{1,10} \rightarrow 10_{1,9}$
216630.234	A-CH ₃ CHO	$11_{1,10} \rightarrow 10_{1,9}$
216638.258	c-C ₃ H	$4_{1,3}, 7/2, 4 \rightarrow 3_{1,2}, 5/2, 3$
216641.130	c-C ₃ H	$4_{1,3}, 7/2, 3 \rightarrow 3_{1,2}, 5/2, 2$
216710.444	p-H ₂ S	$2_{2,0} \rightarrow 2_{1,1}$
217104.919	SiO	$5 \rightarrow 4$
217238.538	DCN	$3 \rightarrow 2$
217296.605	¹³ CN	$2, 3/2, 2, 1 \rightarrow 1, 1/2, 1, 0$

Tabla B.1: Continuación.

Frecuencia [MHz]	Molécula	Transición
217301.175	^{13}CN	$2,3/2,2,2 \rightarrow 1,1/2,1,1$
217303.191	^{13}CN	$2,3/2,2,3 \rightarrow 1,1/2,1,2$
217304.927	^{13}CN	$2,3/2,1,2 \rightarrow 1,1/2,0,1$
217428.563	^{13}CN	$2,5/2,2,3 \rightarrow 1,3/2,1,2$
217436.350	^{13}CN	$2,5/2,2,2 \rightarrow 1,3/2,1,1$
217437.702	^{13}CN	$2,5/2,2,2 \rightarrow 1,3/2,1,2$
217443.722	^{13}CN	$2,5/2,2,1 \rightarrow 1,3/2,1,1$
217443.722	^{13}CN	$2,5/2,2,1 \rightarrow 1,3/2,1,0$
217467.150	^{13}CN	$2,5/2,3,4 \rightarrow 1,3/2,2,3$
217467.150	^{13}CN	$2,5/2,3,3 \rightarrow 1,3/2,2,2$
217469.151	^{13}CN	$2,5/2,3,2 \rightarrow 1,3/2,2,1$
217571.404	$l\text{-C}_3\text{H}$	$^2\Pi_{1/2}, 19/2^+, 9 \rightarrow 17/2^-, 8$
217571.667	$l\text{-C}_3\text{H}$	$^2\Pi_{1/2}, 19/2^+, 10 \rightarrow 17/2^-, 9$
217773.402	$l\text{-C}_3\text{H}$	$^2\Pi_{1/2}, 19/2^-, 9 \rightarrow 17/2^+, 8$
217773.513	$l\text{-C}_3\text{H}$	$^2\Pi_{1/2}, 19/2^-, 10 \rightarrow 17/2^+, 9$
217822.057	$p\text{-C}_3\text{H}_2$	$6_{0,6} \rightarrow 5_{1,5}$
217822.180	$o\text{-C}_3\text{H}_2$	$6_{1,6} \rightarrow 5_{0,5}$
217940.045	$o\text{-C}_3\text{H}_2$	$5_{1,4} \rightarrow 4_{2,3}$
218160.462	$p\text{-C}_3\text{H}_2$	$5_{2,4} \rightarrow 4_{1,3}$
218222.187	$p\text{-H}_2\text{CO}$	$3_{0,3} \rightarrow 2_{0,2}$
218324.709	HC_3N	$24 \rightarrow 23$
218440.063	$\text{E-CH}_3\text{OH}$	$4_2 \rightarrow 3_1$
218475.634	$p\text{-H}_2\text{CO}$	$3_{2,2} \rightarrow 2_{2,1}$
218448.823	$p\text{-C}_3\text{H}_2$	$8_{2,6} \rightarrow 8_{1,7}$
218449.400	$o\text{-C}_3\text{H}_2$	$8_{3,6} \rightarrow 8_{2,7}$
218732.683	$o\text{-C}_3\text{H}_2$	$7_{1,6} \rightarrow 7_{0,7}$
218732.767	$p\text{-C}_3\text{H}_2$	$7_{2,6} \rightarrow 7_{1,7}$
218760.062	$p\text{-H}_2\text{CO}$	$3_{2,1} \rightarrow 2_{2,0}$
218837.007	C_4H	$23, 47/2 \rightarrow 22, 45/2$
218875.374	C_4H	$23, 45/2 \rightarrow 22, 43/2$
218903.355	OCS	$18 \rightarrow 17$
219560.358	C^{18}O	$2 \rightarrow 1$
219798.274	HNCO	$10_{0,10} \rightarrow 9_{0,9}$
219908.481	$o\text{-H}_2^{13}\text{CO}$	$3_{1,2} \rightarrow 2_{1,1}$
219934.040	C^{15}N	$2,5/2,2 \rightarrow 1,3/2,1$
219934.820	C^{15}N	$2,5/2,3 \rightarrow 1,3/2,2$
219949.389	SO	$5_6 \rightarrow 4_5$
220177.558	$o\text{-H}_2\text{CCO}$	$11_{1,11} \rightarrow 10_{1,10}$
220398.684	^{13}CO	$2 \rightarrow 1$
220679.287	$\text{E-CH}_3\text{CN}$	$12_4 \rightarrow 11_4$
220709.016	$\text{A-CH}_3\text{CN}$	$12_3 \rightarrow 11_3$

Tabla B.1: Continuación.

Frecuencia [MHz]	Molécula	Transición
220730.259	E-CH ₃ CN	12 ₂ → 11 ₂
220743.009	E-CH ₃ CN	12 ₁ → 11 ₁
220747.259	A-CH ₃ CN	12 ₀ → 11 ₀
221965.221	SO ₂	11 _{1,11} → 10 _{0,10}
222199.879	o-H ₂ CCO	11 _{3,9} → 10 _{3,8}
222200.199	o-H ₂ CCO	11 _{3,8} → 10 _{3,7}
222228.629	p-H ₂ CCO	11 _{2,10} → 10 _{2,9}
223650.093	E-CH ₃ CHO	12 _{1,12} → 11 _{1,11}
223660.603	A-CH ₃ CHO	12 _{1,12} → 11 _{1,11}
224327.246	o-H ₂ CCO	11 _{1,10} → 10 _{1,9}
224714.390	C ¹⁷ O	2 → 1
224868.307	l-C ₃ H ⁺	10 → 9
225554.609	CH ₂ NH	1 _{1,1} → 0 _{0,0}
225697.772	o-H ₂ CO	3 _{1,2} → 2 _{1,1}
226287.419	CN	2,3/2,1/2 → 1,3/2,1/2
226298.943	CN	2,3/2,1/2 → 1,3/2,3/2
226303.037	CN	2,3/2,3/2 → 1,3/2,1/2
226314.540	CN	2,3/2,3/2 → 1,3/2,3/2
226332.499	CN	2,3/2,3/2 → 1,3/2,5/2
226341.930	CN	2,3/2,5/2 → 1,3/2,3/2
226359.871	CN	2,3/2,5/2 → 1,3/2,5/2
226548.575	o-H ₂ C ₃	11 _{1,11} → 10 _{1,10}
226551.622	E-CH ₃ CHO	12 _{0,12} → 11 _{0,11}
226592.725	A-CH ₃ CHO	12 _{0,12} → 11 _{0,11}
226616.571	CN	2,3/2,1/2 → 1,1/2,3/2
226632.190	CN	2,3/2,3/2 → 1,1/2,3/2
226659.558	CN	2,3/2,5/2 → 1,1/2,3/2
226663.693	CN	2,3/2,1/2 → 1,1/2,1/2
226679.311	CN	2,3/2,3/2 → 1,1/2,1/2
226874.191	CN	2,5/2,5/2 → 1,3/2,3/2
226874.781	CN	2,5/2,7/2 → 1,3/2,5/2
226875.896	CN	2,5/2,3/2 → 1,3/2,1/2
226887.420	CN	2,5/2,3/2 → 1,3/2,3/2
226892.128	CN	2,5/2,5/2 → 1,3/2,5/2
226905.357	CN	2,5/2,3/2 → 1,3/2,5/2
227169.143	o-C ₃ H ₂	4 _{3,2} → 3 _{2,1}
228348.618	C ₄ H	24, 49/2 → 23, 47/2
228386.966	C ₄ H	24, 47/2 → 23, 45/2
228910.481	DNC	3 → 2
229213.636	l-C ₃ H	² Π _{3/2} , 21/2 ⁺ , 11 → 19/2 ⁻ , 10
229214.005	l-C ₃ H	² Π _{3/2} , 21/2 ⁺ , 10 → 19/2 ⁻ , 9

Tabla B.1: Continuación.

Frecuencia [MHz]	Molécula	Transición
229432.781	<i>l</i> -C ₃ H	$^2\Pi_{3/2}, 21/2^-, 11 \rightarrow 19/2^+, 10$
229433.316	<i>l</i> -C ₃ H	$^2\Pi_{3/2}, 21/2^-, 10 \rightarrow 19/2^+, 9$
229758.756	E-CH ₃ OH	$8_{-1} \rightarrow 7_0$
230537.999	CO	$2 \rightarrow 1$
231060.993	OCS	$19 \rightarrow 18$
231220.684	¹³ CS	$5 \rightarrow 4$
235151.721	SO ₂	$4_{2,2} \rightarrow 3_{1,3}$
235380.046	CO ⁺	$2,3/2 \rightarrow 1,3/2$
235789.641	CO ⁺	$2,3/2 \rightarrow 1,1/2$
235996.212	E-CH ₃ CHO	$12_{1,11} \rightarrow 11_{1,10}$
236049.131	A-CH ₃ CHO	$12_{1,11} \rightarrow 11_{1,10}$
236062.553	CO ⁺	$2,5/2 \rightarrow 1,3/2$
236452.293	SO	$2_1 \rightarrow 1_2$
236727.020	<i>o</i> -H ₂ CS	$7_{1,7} \rightarrow 6_{1,6}$
237525.838	C ³⁶ S	$5 \rightarrow 4$
237859.735	C ₄ H	$25, 51/2 \rightarrow 24, 49/2$
237898.065	C ₄ H	$25, 49/2 \rightarrow 24, 47/2$
239096.495	A-CH ₃ CN	$13_3 \rightarrow 12_3$
239119.503	E-CH ₃ CN	$13_2 \rightarrow 12_2$
239137.914	A-CH ₃ CN	$13_0 \rightarrow 12_0$
239746.219	A-CH ₃ OH	$5_1 \rightarrow 4_1$
240185.798	<i>o</i> -H ₂ CCO	$12_{1,12} \rightarrow 11_{1,11}$
240266.872	<i>p</i> -H ₂ CS	$7_{0,7} \rightarrow 6_{0,6}$
240382.051	<i>p</i> -H ₂ CS	$7_{2,6} \rightarrow 6_{2,5}$
240393.037	<i>o</i> -H ₂ CS	$7_{3,5} \rightarrow 6_{3,4}$
240393.762	<i>o</i> -H ₂ CS	$7_{3,4} \rightarrow 6_{3,3}$
240549.066	<i>p</i> -H ₂ CS	$7_{2,5} \rightarrow 6_{2,4}$
241016.089	C ³⁴ S	$5 \rightarrow 4$
241615.798	SO ₂	$5_{2,4} \rightarrow 4_{1,3}$
241700.159	E-CH ₃ OH	$5_0 \rightarrow 4_0$
241767.234	E-CH ₃ OH	$5_{-1} \rightarrow 4_{-1}$
241774.032	HNCO	$11_{0,11} \rightarrow 10_{0,10}$
241791.352	A-CH ₃ OH	$5_0 \rightarrow 4_0$
241813.255	E-CH ₃ OH	$5_{-4} \rightarrow 4_{-4}$
241879.025	E-CH ₃ OH	$5_1 \rightarrow 4_1$
241904.147	E-CH ₃ OH	$5_{-2} \rightarrow 4_{-2}$
241904.643	E-CH ₃ OH	$5_2 \rightarrow 4_2$
242118.136	A-CH ₃ CHO	$13_{1,13} \rightarrow 12_{1,12}$
242375.721	<i>p</i> -H ₂ CCO	$12_{0,12} \rightarrow 11_{0,11}$
242913.609	C ³³ S	$5 \rightarrow 4$
243915.788	A-CH ₃ OH	$5_{-1} \rightarrow 4_{-1}$

Tabla B.1: Continuación.

Frecuencia [MHz]	Molécula	Transición
244048.504	o-H ₂ CS	7 _{1,6} → 6 _{1,5}
244222.155	o-C ₃ H ₂	3 _{2,1} → 2 _{1,2}
244254.220	SO ₂	14 _{0,14} → 13 _{1,13}
244712.254	o-H ₂ CCO	12 _{1,11} → 11 _{1,10}
244832.176	A-CH ₃ CHO	13 _{0,13} → 12 _{0,12}
244935.555	CS	5 → 4
245125.866	CH ₂ NH	4 _{1,4} → 3 _{1,3}
245563.423	SO ₂	10 _{3,7} → 10 _{2,8}
246404.588	SO	3 ₂ → 2 ₃
246663.395	³⁴ SO	6 ₅ → 5 ₄
247348.016	l-C ₃ H ⁺	11 → 10
247370.338	C ₄ H	26, 53/2 → 25, 51/2
247408.648	C ₄ H	26, 51/2 → 25, 49/2
248057.403	SO ₂	15 _{2,14} → 15 _{1,15}
249054.415	o-C ₃ H ₂	5 _{2,3} → 4 _{3,2}
249367.939	p-H ₂ C ₃	12 _{0,12} → 11 _{0,11}
249544.145	c-C ₃ H	6 _{1,6} , 13/2, 7 → 5 _{1,5} , 11/2, 6
249544.343	c-C ₃ H	6 _{1,6} , 13/2, 6 → 5 _{1,5} , 11/2, 5
249746.630	c-C ₃ H	6 _{1,6} , 11/2, 5 → 5 _{1,5} , 9/2, 4
249746.873	c-C ₃ H	6 _{1,6} , 11/2, 6 → 5 _{1,5} , 9/2, 5
250436.842	NO	² Π _{1/2} , (5/2 ⁺ , 7/2) → (3/2 ⁻ , 5/2)
250440.653	NO	² Π _{1/2} , (5/2 ⁺ , 5/2) → (3/2 ⁻ , 3/2)
250448.526	NO	² Π _{1/2} , (5/2 ⁺ , 3/2) → (3/2 ⁻ , 1/2)
250475.419	NO	² Π _{1/2} , (5/2 ⁺ , 3/2) → (3/2 ⁻ , 3/2)
250708.242	NO	² Π _{1/2} , (5/2 ⁻ , 5/2) → (3/2 ⁺ , 5/2)
250753.134	NO	² Π _{1/2} , (5/2 ⁻ , 3/2) → (3/2 ⁺ , 3/2)
250796.423	NO	² Π _{1/2} , (5/2 ⁻ , 7/2) → (3/2 ⁺ , 5/2)
250815.610	NO	² Π _{1/2} , (5/2 ⁻ , 5/2) → (3/2 ⁺ , 3/2)
250816.930	NO	² Π _{1/2} , (5/2 ⁻ , 3/2) → (3/2 ⁺ , 1/2)
251174.624	l-C ₃ H	² Π _{3/2} , 23/2 ⁻ , 12 → 21/2 ⁺ , 11
251174.624	l-C ₃ H	² Π _{3/2} , 23/2 ⁻ , 11 → 21/2 ⁺ , 10
251199.676	SO ₂	13 _{1,13} → 12 _{0,12}
251210.586	SO ₂	8 _{3,5} → 8 _{2,6}
251314.362	o-C ₃ H ₂	7 _{0,7} → 6 _{1,6}
251314.369	p-C ₃ H ₂	7 _{1,7} → 6 _{0,6}
251421.265	CH ₂ NH	6 _{0,6} → 5 _{1,5}
251433.892	l-C ₃ H	² Π _{3/2} , 23/2 ⁺ , 12 → 21/2 ⁻ , 11
251434.415	l-C ₃ H	² Π _{3/2} , 23/2 ⁺ , 11 → 21/2 ⁻ , 10
251508.713	p-C ₃ H ₂	6 _{1,5} → 5 _{2,4}
251527.325	o-C ₃ H ₂	6 _{2,5} → 5 _{1,4}
251748.328	o-H ₂ C ₃	12 _{1,11} → 11 _{1,10}

Tabla B.1: Continuación.

Frecuencia [MHz]	Molécula	Transición
251773.193	p-C ₃ H ₂	10 _{3,7} → 10 _{2,8}
251773.421	o-C ₃ H ₂	10 _{4,7} → 10 _{3,8}
251825.759	SO	6 ₅ → 5 ₄
252409.829	p-C ₃ H ₂	8 _{1,7} → 8 _{0,8}
252409.834	o-C ₃ H ₂	8 _{2,7} → 8 _{1,8}
252422.933	¹³ CCH	3, 7/2, 4, 9/2 → 2, 5/2, 3, 7/2
252424.122	¹³ CCH	3, 7/2, 4, 7/2 → 2, 5/2, 3, 5/2
252447.991	¹³ CCH	3, 7/2, 3, 5/2 → 2, 5/2, 2, 3/2
252449.265	¹³ CCH	3, 7/2, 3, 7/2 → 2, 5/2, 2, 5/2
252457.865	¹³ CCH	3, 5/2, 3, 7/2 → 2, 3/2, 2, 5/2
252468.774	¹³ CCH	3, 5/2, 3, 5/2 → 2, 3/2, 2, 3/2
252480.925	¹³ CCH	3, 5/2, 2, 5/2 → 2, 3/2, 1, 3/2
252489.308	¹³ CCH	3, 5/2, 2, 3/2 → 2, 3/2, 1, 1/2
252697.373	c-C ₃ H	5 _{1,4} , 11/2, 6 → 4 _{1,3} , 9/2, 5
252698.198	c-C ₃ H	5 _{1,4} , 11/2, 5 → 4 _{1,3} , 9/2, 4
252881.049	c-C ₃ H	5 _{1,4} , 9/2, 4 → 4 _{1,3} , 7/2, 3
252881.590	c-C ₃ H	5 _{1,4} , 9/2, 5 → 4 _{1,3} , 7/2, 4
253207.017	³⁴ SO	6 ₆ → 5 ₅
253570.476	NS	² Π _{1/2} , 11/2 ⁻ , 13/2 → 9/2 ⁺ , 11/2
253570.476	NS	² Π _{1/2} , 11/2 ⁻ , 11/2 → 9/2 ⁺ , 9/2
253572.148	NS	² Π _{1/2} , 11/2 ⁻ , 9/2 → 9/2 ⁺ , 7/2
253968.393	NS	² Π _{1/2} , 11/2 ⁺ , 13/2 → 9/2 ⁻ , 11/2
253970.581	NS	² Π _{1/2} , 11/2 ⁺ , 11/2 → 9/2 ⁻ , 9/2
253970.581	NS	² Π _{1/2} , 11/2 ⁺ , 9/2 → 9/2 ⁻ , 7/2
254280.537	SO ₂	6 _{3,3} → 6 _{2,4}
254685.137	CH ₂ NH	4 _{0,4} → 3 _{0,3}
254977.935	SO ⁺	² Π _{1/2} , 11/2 ⁻ → 9/2 ⁺
254987.657	p-C ₃ H ₂	5 _{3,3} → 4 _{2,2}
255326.968	E-CH ₃ CHO	13 _{1,12} → 12 _{1,11}
255353.237	SO ⁺	² Π _{1/2} , 11/2 ⁺ → 9/2 ⁻
255384.754	A-CH ₃ CHO	13 _{1,12} → 12 _{1,11}
255479.391	HC ¹⁸ O ⁺	3 → 2
255553.303	SO ₂	4 _{3,1} → 4 _{2,2}
255742.430	C ¹³ CH	3, 7/2, 3, 5/2 → 2, 5/2, 2, 5/2
255746.086	C ¹³ CH	3, 7/2, 4, 9/2 → 2, 5/2, 3, 7/2
255747.258	C ¹³ CH	3, 7/2, 4, 7/2 → 2, 5/2, 3, 5/2
255756.027	C ¹³ CH	3, 7/2, 3, 5/2 → 2, 5/2, 2, 3/2
255758.767	C ¹³ CH	3, 7/2, 3, 7/2 → 2, 5/2, 2, 5/2
255794.864	C ¹³ CH	3, 5/2, 3, 7/2 → 2, 3/2, 2, 5/2
255803.715	C ¹³ CH	3, 5/2, 3, 5/2 → 2, 3/2, 2, 3/2
255805.399	C ¹³ CH	3, 5/2, 2, 5/2 → 2, 3/2, 1, 3/2

Tabla B.1: Continuación.

Frecuencia [MHz]	Molécula	Transición
256027.107	HCS ⁺	6 → 5
256877.810	³⁴ SO	6 ₇ → 5 ₆
256880.407	C ₄ H	27, 55/2 → 26, 53/2
256918.696	C ₄ H	27, 53/2 → 26, 51/2
257099.967	SO ₂	7 _{3,5} → 7 _{2,6}
257448.128	E-CH ₃ CN	14 ₄ → 13 ₄
257482.790	A-CH ₃ CN	14 ₃ → 13 ₃
257507.560	E-CH ₃ CN	14 ₂ → 13 ₂
257522.425	E-CH ₃ CN	14 ₁ → 13 ₁
257527.381	A-CH ₃ CN	14 ₀ → 13 ₀
258156.996	HC ¹⁵ N	3 → 2
258255.826	SO	6 ₆ → 5 ₅
258942.200	SO ₂	9 _{3,7} → 9 _{2,8}
259011.798	H ¹³ CN	3 → 2
260060.329	HCO	3 _{0,3} , 7/2, 4 → 2 _{0,2} , 5/2, 3
260082.192	HCO	3 _{0,3} , 7/2, 3 → 2 _{0,2} , 5/2, 2
260133.586	HCO	3 _{0,3} , 5/2, 3 → 2 _{0,2} , 3/2, 2
260155.769	HCO	3 _{0,3} , 5/2, 2 → 2 _{0,2} , 3/2, 1
260191.993	o-H ₂ CCO	13 _{1,13} → 12 _{1,12}
260255.338	H ¹³ CO ⁺	3 → 2
260479.764	o-C ₃ H ₂	5 _{3,2} → 4 _{4,1}
260518.018	SiO	6 → 5
261263.473	HN ¹³ C	3 → 2
261805.675	E-CH ₃ OH	2 ₁ → 1 ₀
261843.705	SO	6 ₇ → 5 ₆
261978.120	C ₂ H	3, 7/2, 3 → 2, 5/2, 3
262004.260	C ₂ H	3, 7/2, 4 → 2, 5/2, 3
262006.482	C ₂ H	3, 7/2, 3 → 2, 5/2, 2
262064.986	C ₂ H	3, 5/2, 3 → 2, 3/2, 2
262067.469	C ₂ H	3, 5/2, 2 → 2, 3/2, 1
262078.934	C ₂ H	3, 5/2, 2 → 2, 3/2, 2
262208.614	C ₂ H	3, 5/2, 3 → 2, 5/2, 3
262236.957	C ₂ H	3, 5/2, 3 → 2, 5/2, 2
262250.928	C ₂ H	3, 5/2, 2 → 2, 5/2, 2
262256.907	SO ₂	11 _{3,9} → 11 _{2,10}
262333.965	SO ₂	4 _{4,0} → 5 _{3,3}
262548.202	p-H ₂ CCO	13 _{0,13} → 12 _{0,12}
262596.638	o-H ₂ CCO	13 _{3,11} → 12 _{3,10}
262597.384	o-H ₂ CCO	13 _{3,10} → 12 _{3,9}
262618.994	p-H ₂ CCO	13 _{2,12} → 12 _{2,11}
262760.857	p-H ₂ CCO	13 _{2,11} → 12 _{2,10}

Tabla B.1: Continuación.

Frecuencia [MHz]	Molécula	Transición
262960.097	E-CH ₃ CHO	14 _{0,14} → 13 _{0,13}
265095.061	o-H ₂ CCO	13 _{1,12} → 12 _{1,11}
265759.483	o-C ₃ H ₂	4 _{4,1} → 3 _{3,0}
265886.433	HCN	3 → 2
266270.024	CH ₂ NH	4 _{1,3} → 3 _{1,2}
266389.921	C ₄ H	28, 57/2 → 27, 55/2
266428.190	C ₄ H	28, 55/2 → 27, 53/2
266587.834	H ¹⁵ NC	3 → 2
266838.148	E-CH ₃ OH	5 ₂ → 4 ₁
267557.626	HCO ⁺	3 → 2
268451.151	HOC ⁺	3 → 2
269825.838	l-C ₃ H ⁺	12 → 11
270121.513	p-H ₂ C ₃	13 _{0,13} → 12 _{0,12}
270521.931	o-H ₂ CS	8 _{1,8} → 7 _{1,7}
271529.016	SO ₂	7 _{2,6} → 6 _{1,5}
271981.107	HNC	3 → 2
272716.158	o-H ₂ C ₃	13 _{1,12} → 12 _{1,11}
272751.499	¹³ C ³⁴ S	6 → 5
274521.931	p-H ₂ CS	8 _{0,8} → 7 _{0,7}
274563.412	E-CH ₃ CHO	14 _{1,13} → 13 _{1,12}
274762.103	o-H ₂ ¹³ CO	4 _{1,4} → 3 _{1,3}
274953.744	p-H ₂ CS	8 _{2,6} → 7 _{2,5}
275867.809	A-CH ₃ CN	15 ₃ → 14 ₃
275894.339	E-CH ₃ CN	15 ₂ → 14 ₂
275898.861	C ₄ H	29, 59/2 → 28, 57/2
275910.261	E-CH ₃ CN	15 ₁ → 14 ₁
275937.107	C ₄ H	29, 57/2 → 28, 55/2
277455.398	¹³ CS	6 → 5
278304.512	E-CH ₃ OH	9 ₋₁ → 8 ₀
278887.661	o-H ₂ CS	8 _{1,7} → 7 _{1,6}
278939.438	A-CH ₃ CHO	15 _{1,15} → 14 _{1,14}
279510.790	N ₂ H ⁺	3 → 2
280195.979	o-H ₂ CCO	14 _{1,14} → 13 _{1,13}
281126.944	A-CH ₃ CHO	15 _{0,15} → 14 _{0,14}
281526.919	o-H ₂ CO	4 _{1,4} → 3 _{1,3}
281762.601	SO ₂	15 _{1,15} → 14 _{0,14}
282036.568	SO ₂	6 _{2,4} → 5 _{1,5}
282381.108	p-C ₃ H ₂	4 _{4,0} → 3 _{3,1}
282714.584	p-H ₂ CCO	14 _{0,14} → 13 _{0,13}
282794.399	o-H ₂ CCO	14 _{3,12} → 13 _{3,11}
282795.485	o-H ₂ CCO	14 _{3,11} → 13 _{3,10}

Tabla B.1: Continuación.

Frecuencia [MHz]	Molécula	Transición
282811.466	p-H ₂ CCO	14 _{2,13} → 13 _{2,12}
282988.739	p-H ₂ CCO	14 _{2,12} → 13 _{2,11}
283441.868	p-H ₂ ¹³ CO	4 _{0,4} → 3 _{0,3}
283464.770	SO ₂	16 _{0,16} → 15 _{1,15}
284805.229	p-C ₃ H ₂	8 _{0,8} → 7 _{1,7}
284805.230	o-C ₃ H ₂	8 _{1,8} → 7 _{0,7}
284913.028	p-C ₃ H ₂	6 _{2,4} → 5 _{3,3}
284998.025	o-C ₃ H ₂	7 _{1,6} → 6 _{2,5}
284999.377	p-C ₃ H ₂	7 _{2,6} → 6 _{1,5}
285407.207	C ₄ H	30, 61/2 → 29, 59/2
285445.430	C ₄ H	30, 59/2 → 29, 57/2
285475.477	o-H ₂ CCO	14 _{1,13} → 13 _{1,12}
285721.951	HNCO	13 _{0,13} → 12 _{0,12}
285795.689	o-C ₃ H ₂	6 _{3,4} → 5 _{2,3}
287485.506	SO ₂	8 _{5,3} → 9 _{4,6}
287670.767	A-CH ₃ OH	6 ₁ → 5 ₁
287920.669	c-C ₃ H	7 _{1,7} , 15/2, 8 → 6 _{1,6} , 13/2, 7
287920.669	c-C ₃ H	7 _{1,7} , 15/2, 7 → 6 _{1,6} , 13/2, 6
288124.063	c-C ₃ H	7 _{1,7} , 13/2, 6 → 6 _{1,6} , 11/2, 5
288124.063	c-C ₃ H	7 _{1,7} , 13/2, 7 → 6 _{1,6} , 11/2, 6
289270.928	c-C ₃ H	6 _{1,5} , 13/2, 7 → 5 _{1,4} , 11/2, 6
289271.481	c-C ₃ H	6 _{1,5} , 13/2, 6 → 5 _{1,4} , 11/2, 5
289461.153	c-C ₃ H	6 _{1,5} , 11/2, 5 → 5 _{1,4} , 9/2, 4
289461.805	c-C ₃ H	6 _{1,5} , 11/2, 6 → 5 _{1,4} , 9/2, 5
289644.917	DCN	4 → 3
291237.765	p-H ₂ CO	4 _{2,3} → 3 _{2,2}
291380.441	o-H ₂ CO	4 _{3,2} → 3 _{3,1}
291384.360	o-H ₂ CO	4 _{3,1} → 3 _{3,0}
291485.929	C ³³ S	6 → 5
291948.066	p-H ₂ CO	4 _{2,2} → 3 _{2,1}
292301.412	l-C ₃ H ⁺	13 → 12
292672.889	A-CH ₃ OH	6 ₋₁ → 5 ₋₁
293126.495	o-H ₂ ¹³ CO	4 _{1,3} → 3 _{1,2}
293912.089	CS	6 → 5
294251.460	A-CH ₃ CN	16 ₃ → 15 ₃
294279.748	E-CH ₃ CN	16 ₂ → 15 ₂
294296.726	E-CH ₃ CN	16 ₁ → 15 ₁
294302.386	A-CH ₃ CN	16 ₀ → 15 ₀
294914.937	C ₄ H	31, 63/2 → 30, 61/2
294953.137	C ₄ H	31, 61/2 → 30, 59/2
295172.315	l-C ₃ H	² Π _{1/2} , 27/2 ⁻ , 14 → 25/2 ⁺ , 13

Tabla B.1: Continuación.

Frecuencia [MHz]	Molécula	Transición
295172.315	<i>l</i> -C ₃ H	$^2\Pi_{1/2}, 27/2^-, 13 \rightarrow 25/2^+, 12$
295396.320	³⁴ SO	$7_7 \rightarrow 6_6$
295514.212	<i>l</i> -C ₃ H	$^2\Pi_{1/2}, 27/2^+, 14 \rightarrow 25/2^-, 13$
295514.212	<i>l</i> -C ₃ H	$^2\Pi_{1/2}, 27/2^+, 13 \rightarrow 25/2^-, 12$
296550.053	SO	$7_6 \rightarrow 6_5$
298257.972	³⁴ SO	$7_8 \rightarrow 6_7$
298576.309	SO ₂	$9_{2,8} \rightarrow 8_{1,7}$
298690.463	HCS ⁺	$7 \rightarrow 6$
299699.781	NS	$^2\Pi_{1/2}, 13/2^+, 15/2 \rightarrow 11/2^-, 13/2$
299699.781	NS	$^2\Pi_{1/2}, 13/2^+, 13/2 \rightarrow 11/2^-, 11/2$
299700.901	NS	$^2\Pi_{1/2}, 13/2^+, 11/2 \rightarrow 11/2^-, 9/2$
299739.525	NS	$^2\Pi_{1/2}, 13/2^+, 13/2 \rightarrow 11/2^-, 13/2$
300097.098	NS	$^2\Pi_{1/2}, 13/2^-, 15/2 \rightarrow 11/2^+, 13/2$
300098.611	NS	$^2\Pi_{1/2}, 13/2^-, 13/2 \rightarrow 11/2^+, 11/2$
300098.611	NS	$^2\Pi_{1/2}, 13/2^-, 11/2 \rightarrow 11/2^+, 9/2$
300191.723	p-C ₃ H ₂	$5_{4,2} \rightarrow 4_{3,1}$
300197.596	o-H ₂ CCO	$15_{1,15} \rightarrow 14_{1,14}$
300836.630	o-H ₂ CO	$4_{1,3} \rightarrow 3_{1,2}$
301286.118	SO	$7_7 \rightarrow 6_6$
301361.501	SO ⁺	$^2\Pi_{1/2}, 13/2^+ \rightarrow 11/2^-$
301736.791	SO ⁺	$^2\Pi_{1/2}, 13/2^- \rightarrow 11/2^+$
302369.773	E-CH ₃ OH	$3_0 \rightarrow 2_{-1}$
302991.695	o-H ₂ CCO	$15_{3,13} \rightarrow 14_{3,12}$
302993.234	o-H ₂ CCO	$15_{3,12} \rightarrow 14_{3,11}$
303366.921	A-CH ₃ OH	$1_{-1} \rightarrow 1_0$
303926.814	SiO	$7 \rightarrow 6$
304077.858	SO	$7_8 \rightarrow 6_7$
304208.348	A-CH ₃ OH	$2_{-1} \rightarrow 2_0$
304307.709	o-H ₂ CS	$9_{1,9} \rightarrow 8_{1,8}$
304422.034	C ₄ H	$32, 65/2 \rightarrow 31, 63/2$
304460.209	C ₄ H	$32, 63/2 \rightarrow 31, 61/2$
329330.552	C ¹⁸ O	$3 \rightarrow 2$
329837.133	C ¹⁵ N	$3, 7/2, 3 \rightarrow 2, 5/2, 2$
329837.650	C ¹⁵ N	$3, 7/2, 4 \rightarrow 2, 5/2, 3$
330587.964	¹³ CO	$3 \rightarrow 2$
332505.243	SO ₂	$4_{3,1} \rightarrow 3_{2,2}$
333900.983	³⁴ SO	$8_7 \rightarrow 7_6$
334673.355	SO ₂	$8_{2,6} \rightarrow 7_{1,7}$
337061.124	C ¹⁷ O	$3 \rightarrow 2$
337396.458	C ³⁴ S	$7 \rightarrow 6$
338083.195	o-H ₂ CS	$10_{1,10} \rightarrow 9_{1,9}$

Tabla B.1: Continuación.

Frecuencia [MHz]	Molécula	Transición
338124.488	E-CH ₃ OH	$7_0 \rightarrow 6_0$
338344.588	E-CH ₃ OH	$7_{-1} \rightarrow 6_{-1}$
338408.698	A-CH ₃ OH	$7_0 \rightarrow 6_0$
338583.216	E-CH ₃ OH	$7_3 \rightarrow 6_3$
338721.693	E-CH ₃ OH	$7_2 \rightarrow 6_2$
338722.898	E-CH ₃ OH	$7_{-2} \rightarrow 6_{-2}$
339341.458	SO	$3_3 \rightarrow 2_3$
339446.777	CN	$3,5/2,3/2 \rightarrow 2,5/2,3/2$
339459.996	CN	$3,5/2,3/2 \rightarrow 2,5/2,5/2$
339475.904	CN	$3,5/2,5/2 \rightarrow 2,5/2,5/2$
339516.635	CN	$3,5/2,7/2 \rightarrow 2,5/2,7/2$
340008.126	CN	$3,5/2,5/2 \rightarrow 2,3/2,5/2$
340019.626	CN	$3,5/2,3/2 \rightarrow 2,3/2,3/2$
340031.549	CN	$3,5/2,7/2 \rightarrow 2,3/2,5/2$
340035.408	CN	$3,5/2,3/2 \rightarrow 2,3/2,1/2$
340035.408	CN	$3,5/2,5/2 \rightarrow 2,3/2,3/2$
340052.574	C ³³ S	$7 \rightarrow 6$
340247.770	CN	$3,7/2,7/2 \rightarrow 2,5/2,5/2$
340247.770	CN	$3,7/2,9/2 \rightarrow 2,5/2,7/2$
340248.544	CN	$3,7/2,5/2 \rightarrow 2,5/2,3/2$
340261.773	CN	$3,7/2,5/2 \rightarrow 2,5/2,5/2$
340264.949	CN	$3,7/2,7/2 \rightarrow 2,5/2,7/2$
340714.286	SO	$8_7 \rightarrow 7_6$
341350.206	HCS ⁺	$8 \rightarrow 7$
342882.854	CS	$7 \rightarrow 6$
243218.037	OCS	$20 \rightarrow 19$
344200.109	HC ¹⁵ N	$4 \rightarrow 3$
344310.713	SO	$8_8 \rightarrow 7_7$
345339.769	H ¹³ CN	$4 \rightarrow 3$
345795.990	CO	$3 \rightarrow 2$
345823.288	NS	$^2\Pi_{1/2}, 15/2^-, 17/2 \rightarrow 13/2^+, 14/2$
345823.288	NS	$^2\Pi_{1/2}, 15/2^-, 15/2 \rightarrow 13/2^+, 13/2$
345824.130	NS	$^2\Pi_{1/2}, 15/2^-, 13/2 \rightarrow 13/2^+, 11/2$
345858.195	SH ⁺	$1,0,1/2 \rightarrow 0,1,1/2$
345944.420	SH ⁺	$1,0,1/2 \rightarrow 0,1,3/2$
346220.137	NS	$^2\Pi_{1/2}, 15/2^+, 17/2 \rightarrow 13/2^-, 14/2$
346221.163	NS	$^2\Pi_{1/2}, 15/2^+, 15/2 \rightarrow 13/2^-, 13/2$
346221.163	NS	$^2\Pi_{1/2}, 15/2^+, 13/2 \rightarrow 13/2^-, 11/2$
346528.528	SO	$8_9 \rightarrow 7_8$
346708.493	HCO	$4_{0,4}, 9/2, 5 \rightarrow 3_{0,3}, 7/2, 4$
346725.172	HCO	$4_{0,4}, 9/2, 4 \rightarrow 3_{0,3}, 7/2, 3$

Tabla B.1: Continuación.

Frecuencia [MHz]	Molécula	Transición
346787.898	HCO	$4_{0,4}, 7/2, 4 \rightarrow 3_{0,3}, 5/2, 3$
346804.597	HCO	$4_{0,4}, 7/2, 3 \rightarrow 3_{0,3}, 5/2, 2$
346998.336	H^{13}CO^+	$4 \rightarrow 3$
347330.592	SiO	$8 \rightarrow 7$
347740.011	SO^+	$^2\Pi_{1/2}, 15/2^- \rightarrow 13/2^+$
348115.221	SO^+	$^2\Pi_{1/2}, 15/2^+ \rightarrow 13/2^-$
348211.158	HC^{17}O^+	$4 \rightarrow 3$
349264.002	o-C ₃ H ₂	$5_{5,0} \rightarrow 4_{4,1}$
349312.833	C ₂ H	$4, 9/2, 4 \rightarrow 3, 7/2, 4$
349337.707	C ₂ H	$4, 9/2, 5 \rightarrow 3, 7/2, 4$
349338.989	C ₂ H	$4, 9/2, 4 \rightarrow 3, 7/2, 3$
349399.274	C ₂ H	$4, 7/2, 4 \rightarrow 3, 5/2, 3$
349400.669	C ₂ H	$4, 7/2, 3 \rightarrow 3, 5/2, 2$
349414.640	C ₂ H	$4, 7/2, 3 \rightarrow 3, 5/2, 3$
349603.611	C ₂ H	$4, 7/2, 4 \rightarrow 3, 7/2, 4$
351257.225	SO ₂	$5_{3,3} \rightarrow 4_{2,2}$
351523.296	o-C ₃ H ₂	$7_{3,4} \rightarrow 6_{4,3}$
351768.637	o-H ₂ CO	$5_{1,5} \rightarrow 4_{1,4}$
351781.573	o-C ₃ H ₂	$10_{1,10} \rightarrow 9_{0,9}$
351781.573	p-C ₃ H ₂	$10_{0,10} \rightarrow 9_{1,9}$
351965.963	o-C ₃ H ₂	$9_{1,8} \rightarrow 8_{2,7}$
351965.969	p-C ₃ H ₂	$9_{2,8} \rightarrow 8_{1,7}$
352193.664	o-C ₃ H ₂	$8_{3,6} \rightarrow 7_{2,5}$
353741.312	CO^+	$3, 5/2 \rightarrow 2, 3/2$
354014.247	CO^+	$3, 7/2 \rightarrow 2, 5/2$
354505.476	HCN	$4 \rightarrow 3$
356734.225	HCO^+	$4 \rightarrow 3$

Apéndice C

Artículos de Divulgación y Notas de Prensa

C.1. Barra libre de hidrocarburos en Orión

Artículo de divulgación de Natalia Ruiz Zelmanovitch.

Publicado el 11 de marzo de 2015 en Naukas.¹

Los hidrocarburos son las moléculas orgánicas más simples, formadas tan solo por hidrógeno y carbono. Constituyen una de las principales fuentes de energía del mundo moderno, ya que forman parte del petróleo, del gas natural, de la gasolina; también se encuentran en muchos materiales que usamos habitualmente, como plásticos, fibras o pinturas, e incluso caminamos sobre ellos todos los días, ya que son el componente principal del asfalto.

Pero no solo podemos encontrar hidrocarburos en nuestro planeta: desde los años 70 se sabe que los hidrocarburos están presentes en gran parte del medio interestelar, y una de las cuestiones que la astroquímica busca despejar desde entonces es cómo se forman y cuál es su comportamiento químico en ese entorno.

Para poder estudiarlos, uno de los entornos más apropiados son las regiones de fotodisociación (en inglés, PDRs, de Photodissociation Regions), zonas de transición entre el gas frío y neutro (moléculas en su mayoría) protegido de la radiación ultravioleta, y el gas atómico e ionizado, iluminado por intensos campos de ultravioleta procedentes, en su mayoría, de estrellas masivas [1]. Las regiones de fotodisociación se encuentran en muchos entornos astrofísicos y

a muchas escalas espaciales, desde los núcleos de galaxias con estallidos de formación estelar a las superficies iluminadas de los discos protoplanetarios. Todas ellas muestran una química cuya característica común es la fotodisociación de moléculas causada por la radiación ultravioleta.

El ejemplo más espectacular y cercano de este tipo de región de fotodisociación es la llamada Barra de Orión, que se encuentra dentro de la conocida nebulosa de Orión, situada a unos 1.300 años luz de la Tierra. La nebulosa de Orión es uno de los objetos astronómicos más estudiados de todos los tiempos: se trata de una inmensa nube de gas y polvo considerada, cariñosamente, como una guardería estelar, ya que miles de estrellas comienzan allí su vida. No es la única guardería estelar de la galaxia pero, al ser la más cercana que ha formado estrellas masivas (más de 8 veces la masa del Sol), nos ofrece la oportunidad de estudiar en detalle cómo nacen las estrellas; cómo, una vez formadas, interaccionan con el medio interestelar que las rodea; y, en particular, cómo los intensos campos de radiación ultravioleta estelares acaban por “destruir” (fotodisociar) la nube molecular donde nacieron.

¹<http://naukas.com/2015/03/11/barra-libre-de-hidrocarburos-en-orion/>

La radiación ultravioleta que ioniza átomos y disocia moléculas en la Barra de Orión, procede del famoso conjunto de estrellas masivas del cúmulo del Trapecio, que toma su nombre del asterismo que forman sus cuatro estrellas más brillantes.

Al tener una química controlada por la radiación ultravioleta, en estas regiones se producen especies muy peculiares, como radicales (C_2H , OH , $\text{HCO}\dots$) e iones (SO^+ , CO^+ , CH^+ , $\text{HOC}^+\dots$). Estas especies no existen de manera natural en nuestro planeta, ya que son extremadamente reactivas e inestables y rápidamente reaccionan con otras moléculas para formar nuevos compuestos más estables. Solo pueden formarse en el laboratorio bajo condiciones controladas muy específicas.

El estudio de la Barra de Orión

Con el fin de establecer los límites de la complejidad química del medio interestelar, y utilizando datos obtenidos con un barrido espectral [2] llevado a cabo con el radiotelescopio IRAM-30m (instalado en Sierra Nevada, Granada), un equipo de investigadores liderado por Sara Cuadrado (ASTROMOL, Grupo de Astrofísica Molecular del Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid – CSIC) ha logrado ampliar nuestros conocimientos sobre qué moléculas existen en ambientes irradiados por fuertes campos de radiación ultravioleta y cómo se forman.

Sara nos cuenta que “Aunque la Barra de Orión es un entorno hostil donde cabría esperar que solo hubiese moléculas muy simples, las observaciones muestran un espectro con más de 500 líneas procedentes de la emisión de más de 60 moléculas diferentes que contienen de 2 a 6 átomos. Lo sorprendente es que, ¡aproximadamente el 40% de las líneas detectadas, pertenecen a hidrocarburos [3]! Con lo cual, no está de más hacer un juego de palabras y afirmar que disponemos de una zona con barra libre de hidrocarburos en Orión”.

¿Pero cómo se forman estos hidrocarburos en el medio interestelar y por qué son tan abundantes? Hasta ahora, en los estudios realizados en otras regiones irradiadas por campos de radiación ultravioleta menos intensos, como la famosa Nebulosa de la Cabeza de Caballo, o en nubes interestelares difusas, los resultados obtenidos mediante el análisis de las observaciones no coincidían con los resultados teóricos obtenidos de los modelos en fase gaseosa [4]. Las abundancias medidas de hidrocarburos en esas regiones eran mucho mayores que las que predecían estos modelos. Es decir, la química en fase gaseosa no era suficiente para explicar estas altas abundancias.

Los investigadores buscaron fuentes alternativas de carbono que pudiesen estar contribuyendo a la cantidad de hidrocarburos formados a través de reacciones en el gas, y pensaron en los hidrocarburos aromáticos policíclicos (HAPs o PAHs en inglés). Los HAPs son potentes contaminantes ambientales, pero también están presentes de forma ubicua en el universo (ver Fig. C.1). En estas regiones, la incidencia de radiación sobre los HAPs rompería por completo la estructura cíclica de estos compuestos, formando pequeñas moléculas de hidrógeno y carbono, y contribuyendo a la cantidad de hidrocarburos formados mediante reacciones en fase gas.

Sin embargo, este equipo ha descubierto que, para explicar las altas abundancias de hidrocarburos en la Barra de Orión, no hace falta recurrir a la destrucción de HAPs (o su contribución no es la dominante) ya que las estrellas del Trapecio iluminan la región con campos de radiación ultravioleta tan intensos que el gas molecular alcanza temperaturas muy altas, con lo cual entran en acción nuevas reacciones químicas en fase gaseosa que necesitan energías muy elevadas para producirse [5].

Con esto se da un paso en más en la comprensión de los resultados y detalles de la fotodisociación en las nubes de gas, ayudándonos a mejorar nuestro conocimiento de la química del carbono interestelar y a saber más sobre cómo aumenta la complejidad química en el espacio.

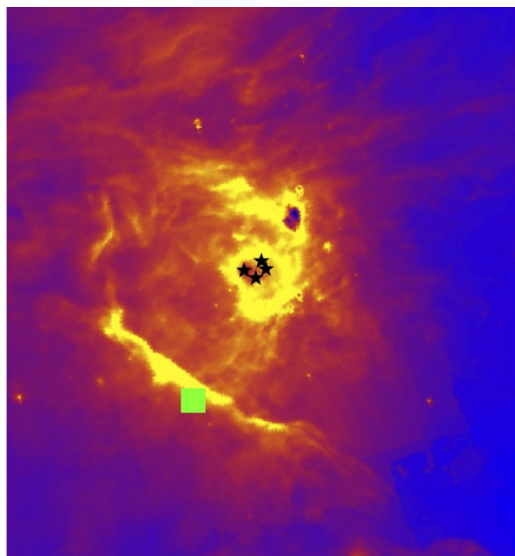


Figura C.1: Imagen del centro de la nebulosa de Orión en el infrarrojo (a 8 micras) tomada por la cámara IRAC a bordo del telescopio espacial Spitzer (datos procedentes del archivo público de NASA/Spitzer). A estas longitudes de onda la emisión está dominada por hidrocarburos aromáticos policíclicos (HAPs). Se muestra también la posición del cúmulo del Trapecio (marcadas con estrellas) y la región estudiada en este trabajo (el recuadro verde). Créditos: NASA/Spitzer; Javier R. Goicoechea.

Notas

Este trabajo ha sido publicado en el artículo científico “The chemistry and spatial distribution of small hydrocarbons in UV-irradiated molecular clouds: the Orion Bar PDR”

[1] Generalmente, estrellas masivas de tipo OB, al menos 8 veces más masivas que el Sol y fuente principal de radiación ultravioleta en galaxias como la nuestra.

[2] Los barridos espectrales son una de las herramientas más importante en el campo de la astroquímica para estudiar el medio interestelar, dado que permiten llevar a cabo una caracterización química completa de la región objeto de estudio. En este caso, se han obtenido líneas espectrales en el rango milimétrico, uno de los de menor energía del espectro electromagnético y cuya emisión está dominada por transiciones de baja energía producida por moléculas.

[3] C_2H , C_4H , $c-C_3H_2$, $c-C_3H$, $C^{13}CH$, ^{13}CCH , $l-C_3H$, $l-C_3H^+$ y $l-H_2C_3$ en orden decreciente de abundancia.

[4] Estos modelos intentan simular computacionalmente las condiciones físicas y químicas de las nubes del medio interestelar, simulando cientos de reacciones químicas y procesos que se producen en las distintas regiones.

[5] Las reacciones endotérmicas (o con barreras, es decir, las que sólo tienen lugar a partir de ciertas temperaturas) en fase gas entre C^+ , radicales y H_2 , pueden dominar la química y favorecer la formación de los hidrocarburos. Aun así, puede ser necesaria la fotodisociación de HAPs, carbonos amorfos hidrogenados (HACs, Hydrogenated Amorphous Carbons) y de granos muy pequeños (VSGs, Very Small Grains), así como un mayor conocimiento de la química superficial en granos carbonosos para explicar las abundancias de los hidrocarburos más complejos.

C.2. Primera imagen en alta resolución del borde de la nube molecular de Orión



Nota de prensa

CSIC comunicación

Tel.: +34 91 568 14 77

g.prensa@csic.es

www.csic.es

Madrid, jueves 11 de agosto de 2016

Primera imagen en alta resolución del borde de la nube molecular de Orión

- Un equipo liderado por el CSIC delimita la morfología y la actividad que ocurre en el borde de la nube de Orión
- Los astrofísicos observan Orión para estudiar el proceso de nacimiento y evolución de las estrellas supermasivas

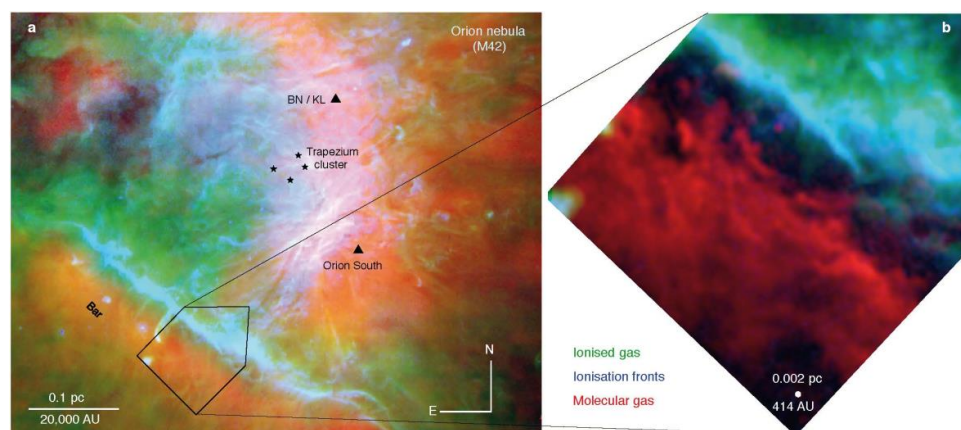


Imagen “multicolor” de la nebulosa y nube molecular de Orión. En rojo se muestra la emisión del gas molecular, en verde el gas atómico (ionizado por la radiación ultravioleta procedente de las estrellas del Trapecio), y en azul el interfaz entre el gas ionizado y el gas neutro. El zoom muestra la región observada de la Barra de Orión con el observatorio ALMA.

Un estudio internacional liderado por investigadores del Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC) ha obtenido la primera imagen en alta resolución del borde de la nube molecular de Orión, la región de formación de estrellas masivas más cercana al Sistema Solar. Esta imagen permite estudiar la morfología y actividad que tiene lugar en la zona. Los resultados se publican en la revista *Nature Letters*.

La nebulosa de Orión es la región de formación de estrellas masivas más cercana. Los astrofísicos la observan para estudiar el proceso de nacimiento y evolución de este tipo de estrellas, que, en el caso del cúmulo del Trapecio, llegan a ser hasta 30 veces más masivas y 200.000 veces más luminosas que el Sol. Orión está tan cerca que los

investigadores no solo pueden tomar imágenes de la región de formación estelar en su conjunto, sino que también estudian detalles concretos de una zona en particular.

Combinando imágenes del borde de la nube de Orión, obtenidas por interferometría con el observatorio ALMA, y utilizando observaciones previas con el telescopio Very Large Telescope en el rango visible, un equipo de investigadores, liderado por Javier Goicoechea, del Grupo de Astrofísica Molecular del Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid, ha conseguido delimitar y estudiar con precisión la morfología y la actividad que ocurre en el borde iluminado de la nube (el interfaz donde sucede la transición entre el gas molecular frío y el gas atómico, ionizado y muy caliente).

El investigador Javier Goicoechea explica que: “Hasta ahora teníamos una visión muy estática de lo que ocurre con el gas molecular en esa zona de transición debido a la poca precisión de los instrumentos. Eso ha cambiado radicalmente con ALMA. Los datos obtenidos permiten lograr imágenes con una sensibilidad exquisita, y con una precisión de menos de un segundo de arco (más o menos el tamaño del Sistema Solar a la distancia de Orión). Prácticamente estamos “fotografiando” la piel de Orión”.

“Las imágenes proporcionadas por ALMA revelan que el borde de la nube molecular está formado por pequeñas estructuras filamentosas y rugosidades con patrones periódicos”, detalla el investigador. “El intenso campo de radiación ultravioleta provoca que las capas más externas de la nube molecular se compriman y aumenten su densidad (dando lugar a esos filamentos y grumos). De forma simultánea, el borde de la nube se calienta y se evapora debido a la diferencia de presiones con el medio que la rodea”, añade.

Reservorios de estrellas

“El espacio entre las estrellas, el medio interestelar, está compuesto de gigantescas nubes de gas molecular y pequeños granos de polvo. Además de ser uno de los componentes más fascinantes de la galaxia, las “nubes moleculares” son el reservorio de material para formar nuevas estrellas. Debido a su bajas temperaturas (entre 0 y -250 grados centígrados), la emisión del gas molecular puede detectarse en el rango milimétrico (fotones con energías intermedias entre el infrarrojo y las radioondas)”, explica Goicoechea.

Dentro del contexto de los mecanismos capaces de inducir y regular la formación de estrellas, los investigadores se preguntan si el descubrimiento de grumos y filamentos densos formados por la compresión del borde irradiado de la nube, podrían ser las “semillas” para la formación de una nueva generación de estrellas.

La masa de los grumos detectados con ALMA en Orión es todavía muy pequeña comparada con la que se necesitaría para que la gravedad impulse su colapso y de lugar a protoestrellas. Pero ¿podrían estos grumos unirse en el futuro y dar lugar a condensaciones más masivas?, se pregunta Goicoechea. Nuevas observaciones y modelos ayudarán a entender si estos mecanismos que ocurren en la piel de Orión podrían ser, en definitiva, un mecanismo inductor de formación estelar.



Nota de prensa

CSIC comunicación

Tel.: 91 568 14 77

g.prensa@csic.es

www.csic.es/prensa

Este trabajo ha sido desarrollado en el marco del proyecto Synergy NANOCOSMOS, financiado por el Consejo Europeo de Investigación (European Research Council).

Javier R. Goicoechea, Jérôme Pety, Sara Cuadrado, José Cernicharo, Edwige Chapillon, Asunción Fuente, Maryvonne Gerin, Christine Joblin, Nuria Marcelino & Paolo Pilleri. **Compression and ablation of the photo-irradiated molecular cloud the Orion Bar.** *Nature Letters*. Doi: 10.1038/nature18957

C.3. Violent emissions of newborn stars

RESEARCH NEWS & VIEWS

ASTROPHYSICS

Violent emissions of newborn stars

Interactions between young stars and their parent molecular clouds are poorly understood. High-resolution observations of the Orion nebula now reveal these interactions, which have implications for star formation. [SEE LETTER P.207](#)

MARKUS RÖLLIG

Stars are not static objects — they form, evolve and are then destroyed. In galaxies such as the Milky Way, the gas and dust between stars, which comprise the interstellar medium, accumulate in giant molecular clouds. The densest parts of these clouds eventually collapse under their own weight to create stars. On page 207, Goicoechea *et al.*¹ report their latest observations of one of the closest stellar nurseries, the Orion molecular cloud. They find evidence of strong interactions between young massive stars and the cloud, shedding light on some unknown aspects of star formation.

The general process of star formation is fairly well understood, but many details remain a mystery. In particular, there is a lack of information on the formation of the most massive stars (those about 8–150 times more massive than the Sun). Such massive stars are rare, but they are the primary sources of light in the Milky Way — some are a few hundred thousand times more luminous than the Sun².

When massive stars form, they start to emit energetic radiation, largely in the ultraviolet region of the electromagnetic spectrum. This UV radiation destroys the molecules in the surrounding cloud, creating a layer of atomic gas around young massive stars. In this layer, in the region closest to the star, the radiation is energetic enough to ionize the atoms, forming a bubble of ionized gas. At the edge of this bubble, the most energetic UV photons have already been absorbed, and the atomic gas can survive. The transition zone between the edge of the bubble and the molecular gas is called the photodissociation region (PDR)³. Just like human skin, the PDR protects molecules in the cloud from harmful UV radiation.

Goicoechea and colleagues show that it is possible to observe a PDR with sufficient resolution to directly study how the molecular cloud is pushed away and dispersed by the stellar radiation and winds of young massive stars. The authors use the

Atacama Large Millimeter/submillimeter Array (ALMA) in Chile to study a PDR of the Orion molecular cloud: the Orion Bar (Fig. 1). The data set presented by Goicoechea *et al.* and the level of detail revealed by the ALMA observations are unparalleled, allowing unknown aspects of star formation to be explored.

The Orion Bar is an archetypal PDR that makes an ideal study candidate for two reasons: it is close to Earth, and it is oriented edge-on, which allows astronomers a good look at how radiation is absorbed as it enters the molecular cloud. The local gas density in the PDR controls how quickly this absorption occurs. In low-density gas (a few hundred to a few thousand gas particles per cubic centimetre), the medium gradually becomes opaque to radiation, whereas denser gas (a few million particles per cubic centimetre) becomes opaque much more suddenly. In the Orion Bar, this gradual absorption happens on a scale of 15 arcseconds⁴ (equivalent to less than 1% of the full Moon's angular diameter) before the UV radiation is sufficiently absorbed so that the molecules can survive.

The measurement of 15 arcseconds surprised astronomers because standard

models of PDRs⁵ can explain this value only if the gas in the Orion Bar has a low density. However, radiation observed from the Orion Bar requires high-density gas (a few million particles per cubic centimetre) to explain its emission^{6,7}. In theoretical models, such a high density would require a smaller distance than 15 arcseconds between the atomic and molecular gas layers. In other words, UV radiation is observed to penetrate deeply into the cloud, whereas it should be absorbed by high-density gas.

Earlier studies^{6–8} tried to reconcile this discrepancy by suggesting that the Orion Bar consists of clumps of dense gas embedded in a thinner gas. Such a structure would allow for both high-density molecular emission and deeper penetration of UV radiation into the cloud. Goicoechea *et al.* are the first to directly observe such clumps of dense gas in the Orion Bar. Their results have strong implications for models of PDRs, because they demonstrate that even such an archetypal PDR does not have the stratified transition between atomic and molecular gas layers that was previously assumed⁹.

The authors' results also provide some explanation for the evolution of the Orion Bar. They find evidence of a high-pressure wave expanding into the molecular cloud, which is consistent with the picture of an expanding bubble of ionized gas created by the young massive star in its centre. The bubble pushes against the molecular cloud, compressing dense regions, while dispersing less-dense regions. However, because of the experimental limitations of ALMA, Goicoechea and colleagues only observe a small region of the Orion Bar, in a snapshot of time and at a limited wavelength. To rule out the possibility that the authors observed an atypical region with respect to PDRs in general, it will be necessary

to consider a larger sample size, including PDRs with various local physical conditions.

An expanding bubble of ionized gas is one of the prime candidates proposed to explain how the interaction of young stars with their parent interstellar clouds controls the efficiency of star formation¹⁰. Without these interactions, star formation would be about 10 to 100 times more efficient than what is observed. The detailed nature and relative importance of these interactions with respect to other factors that influence star formation remain largely unknown. Therefore, any direct observation of these processes, as presented by Goicoechea and colleagues, provides a step towards a better understanding of star formation and, consequently, of how the Sun and the Solar System formed. ■



Figure 1 | The Orion Bar. In this image of the Orion nebula taken by the Hubble Space Telescope, the Orion Bar is the bright ridge at the bottom left. Goicoechea *et al.*¹ use high-resolution images of the Orion Bar to study the impact of young stars on their parent molecular clouds.

NASA/C. R. O'DELL & S. K. WONG (RICE UNIV)

Markus Röllig is at *I. Physikalisches Institut,
University of Cologne, 50937 Cologne,
Germany.*
e-mail: roellig@ph1.uni-koeln.de

1. Goicoechea, J. R. *et al.* *Nature* **537**, 207–209 (2016).
2. Martins, F., Schaerer, D. & Hillier, D. J. *Astron. Astrophys.* **436**, 1049–1065 (2005).
3. Hollenbach, D. J. & Tielens, A. G. G. M. *Annu. Rev. Astron. Astrophys.* **35**, 179–215 (1997).
4. Walmsley, C. M., Natta, A., Oliva, E. & Testi, L. *Astron. Astrophys.* **364**, 301–317 (2000).
5. Röllig, M. *et al.* *Astron. Astrophys.* **467**, 187–206 (2007).
6. Parmar, P. S., Lacy, J. H. & Achtermann, J. M. *Astrophys. J.* **372**, L25–L28 (1991).
7. Hogerheijde, M. R., Jansen, D. J. & van Dishoeck, E. F. *Astron. Astrophys.* **294**, 792–810 (1995).
8. Stutzki, J., Bensch, F., Heithausen, A., Ossenkopf, V. & Zielinsky, M. *Astron. Astrophys.* **336**, 697–720 (1998).
9. Andree-Labsch, S., Ossenkopf, V. & Röllig, M. Preprint at: <http://arxiv.org/abs/1405.5553> (2014).
10. Krumholz, M. R. *et al.* in *Protostars and Planets VI* (eds Beuther, H., Klessen, R. S., Dullemond, C. P. & Henning, T.) 243–266 (Univ. Arizona Press, 2014).

C.4. Ácido fórmico entre las estrellas

Artículo de divulgación de Rafael Bachiller.

Publicado el 4 de diciembre de 2016 en El Mundo.^{II}

Un equipo de astrónomos españoles ha descubierto que las moléculas de ácido fórmico —que abundan en las nubes interestelares— pueden alterar su geometría por el efecto de la radiación ultravioleta ambiente. La identificación en el espacio de este fenómeno de “foto-conmutación” —que ya se conocía en los laboratorios terrestres— viene a confirmar que los mismos procesos químicos operan en todo el cosmos, lo que añade un nuevo argumento a la idea de que la vida pueda ser un fenómeno generalizado en el universo.

El ácido de las hormigas

Algunas especies de hormigas son capaces de producir un ácido que, al inyectárnoslo cuando nos muerden, nos produce un desagradable picor y escozor. Este ácido lo producen también algunas abejas y las ortigas, pero es denominado “fórmico” por su relación con las hormigas (en latín formica). Es el ácido conocido como “metanoico” en el argot de los químicos, el más simple de todos los ácidos orgánicos: sus moléculas tan solo contienen un átomo de carbono, además de dos de oxígeno y dos de hidrógeno. Así pues, la fórmula del ácido fórmico se puede expresar como H-COOH.

Pero, exactamente con esta misma fórmula, se conocen en la Tierra dos variedades geométricas (dos “isómeros”) del mismo ácido fórmico. Estas dos variedades (designadas con los brevísimos nombres “trans” y “cis”) tan sólo difieren en la disposición relativa de los dos átomos de hidrógeno. La variedad trans es la más estable en condiciones normales, mientras que la variedad cis necesita más energía para formarse y, por tanto, es más inestable.

Por todo ello, la variedad trans del ácido fórmico es la más ampliamente conocida tanto en la Tierra como en el espacio. De hecho, esta variedad se había detectado desde hace tiempo en muchas nubes interestelares e incluso en la cola del cometa Hale–Bopp.

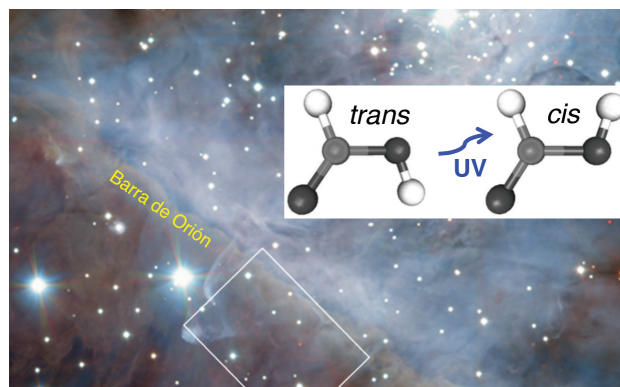


Foto-conmutación

Se sabe que, en la Tierra, una molécula trans de ácido fórmico puede convertirse en una molécula cis mediante la absorción de un fotón, esto es, cuando se somete al ácido a la iluminación con luz ultravioleta. Es el resultado de un fenómeno más general que se conoce como foto-conmutación o foto-isomerización (en inglés photoswitching) y que tiene mucha aplicación en campos tan diversos como la bioquímica y la nanotecnología. Gracias a este fenómeno se pueden fabricar diminutos interruptores moleculares que resultan de utilidad en el almacenamiento de datos informáticos.

Ya que sólo la variedad trans del ácido fórmico había sido detectada en varias regiones del espacio interestelar, un grupo de astrónomos españoles coordinado por Sara Cuadrado (CSIC) ha estado buscando ahora la variedad cis (mucho más rara e inestable) en una variedad de nubes. Resulta que esta variedad tan solo ha sido detectada en el borde de las nubes de Orión (la región denominada la “Barra de Orión”), donde la iluminación ultravioleta debida a estrellas vecinas es particularmente alta. Los investigadores concluyen que los ultravioletas son capaces de comunicar una gran cantidad de energía a las moléculas trans que, tras sufrir un fenómeno de fluorescencia, acaban siendo convertidas en moléculas cis.

^{II}<http://www.elmundo.es/ciencia/2016/12/04/5843180e268e3e283a8b45e6.html>



Figura C.2: El cometa Hale Bopp, donde también se ha detectado ácido fórmico. Créditos: E. Kolmhofer, H. Raab; Johannes Kepler Observatory (Linz, Austria).

Una misma química

Así pues, estas nuevas observaciones demuestran que el ácido fórmico se comporta en las nubes interestelares de manera idéntica a como lo hace en la Tierra. Esto hace pensar que otros fenómenos de foto-conmutación pueden tener lugar para muchas más moléculas orgánicas en el espacio, lo que debe contribuir a enriquecer químicamente el medio.

Con tan sólo 5 átomos, el ácido fórmico es una molécula muy sencilla, pero sin duda es un ladrillo más con el que, mediante reacciones químicas, poder elaborar moléculas

las más y más complejas, en particular aquellas relacionadas con el origen de la vida.

Resulta reconfortante confirmar que los mismos procesos químicos que operan en la Tierra tienen también lugar en otros lugares de nuestra galaxia y, muy posiblemente, en otras galaxias. Esta universalidad de una misma química, la gran exuberancia de exoplanetas descubiertos en todo tipo de estrellas, y la robustez de la vida que, al menos en la Tierra, ha resistido a todo tipo de cataclismos, todo ello nos lleva a pensar que la vida debe de ser un fenómeno generalizado en el universo.

También interesante

Este trabajo ha sido publicado en el artículo científico “Trans–cis molecular photoswitching in interstellar space”.

■ El ácido fórmico fue aislado por vez primera en el siglo XVII cuando el gran naturalista inglés John Ray (1627–1705), considerado el padre de la botánica moderna, lo destiló machacando una gran cantidad de hormigas rojas.

■ El explorador Sir Henry Morton Stanley, famoso por sus viajes en África central donde encontró al desaparecido David Livingstone, informó a la Royal Geographic Society en 1889 que los nativos del Congo preparaban un veneno a base de hormigas rojas cocidas en aceite de palma. El efecto de este veneno, que se aplicaba en las puntas de las flechas, se atribuía al ácido fórmico.

Contribución Personal

Esta memoria para acceder al grado de Doctor en la Universidad Autónoma de Madrid es de mi autoría. Toda la información e imágenes procedentes de terceros que he utilizado en la redacción de esta tesis doctoral, más específicamente en los temas de la Introducción, han sido debidamente referenciadas y no se pretende en ningún caso violar los derechos de autor o de propiedad intelectual. Su uso tiene simplemente carácter ilustrativo y académico, y sólo se ha utilizado para poner en contexto el tema principal de mi tesis doctoral: el estudio del contenido químico de la región de fotodisociación de la Barra de Orión. La investigación científica contenida en esta tesis se basa en observaciones astronómicas, así como en modelos de transferencia radiativa realizados con el código Madex y métodos Montecarlo, y modelos fotoquímicos llevados a cabo con el código de PDR Meudon para interpretar dichas observaciones.

Observaciones y Propuestas

He participado activamente en varias campañas de observación con el telescopio IRAM-30m, incluida la preparación y observación del barrido espectral realizado con los receptores EMIR y los nuevos *backends* FFTS de IRAM-30m. También he participado en la observación de otros proyectos no relacionados con mi tesis doctoral. He llevado a cabo la reducción de todos los espectros (con ciertas complicaciones debido al modo de observación necesario en Orión), así como la identificación, caracterización y análisis de todas las líneas detectadas en el barrido espectral de la Barra de Orión, lo cual ha constituido la parte central de mi trabajo diario. También he realizado las observaciones relativas a los cartografiados de líneas rotacionales excitadas a 0.8 mm con el radiotelescopio IRAM-30m y que sirvieron como *short-spacings* en las primeras imágenes de ALMA de Orion publicadas en la revista Nature. Los *scripts* para la obtención de estos cartografiados fueron realizados por J. Pety. Aunque realicé una primera reducción de los mapas, las imágenes finales presentadas en esta tesis y en los artículos fueron realizadas por J.R. Goicoechea. He participado como autora o coautora en más de 10 propuestas aceptadas para la observación de varios proyectos en el radiotelescopio IRAM-30m. También he contribuido a la redacción de las primeras propuestas de observación de la Barra de Orión con ALMA (Ciclo 1 y Ciclo 3), así como a la interpretación y discusión de las imágenes obtenidas (las cuales han dado lugar a 3 publicaciones de momento). Los datos publicados de ALMA fueron calibrados y reducidos por E. Chapillon y J. Pety (IRAM-Grenoble), y por J.R. Goicoechea.

Modelos de transferencia radiativa y fotoquímica

Con objeto de interpretar las observaciones astronómicas he utilizado el catálogo de espectroscopía molecular LVG y código de transferencia radiativa y excitación molecular desarrollado y actualizado por J. Cernicharo. Todos los análisis y modelos realizados con este código son de mi autoría, con excepción del cálculo de las constantes espectroscópicas del hidrocarburo C_3H^+ (en Cuadrado et al. 2015) y las frecuencias de línea de los conformeros cis y trans-HCOOH (en Cuadrado et al. 2016) que fueron realizados por J. Cernicharo. También he desarrollado un código en lenguaje Fortran para poder ejecutar y analizar estadísticamente un número muy elevado de modelos MADEx no-LTE automáticamente, lo que nos ha permitido estimar las condiciones físicas que reproducen la emisión de aquellas moléculas con tasas de colisión inelásticas conocidas. Este programa también ha sido empleado en otros trabajos científicos no relacionados con mi tesis doctoral (Goicoechea et al. 2015a). Los modelos de excitación Montecarlo y modelos de fotoquímica realizados con el código Meudon presentados en esta tesis fueron obtenidos por J.R. Goicoechea (y por E. Bron en el artículo de Goicoechea et al. 2017). Mi contribución en este caso ha sido la interpretación y discusión de los resultados.

Publicaciones

He participado como primera autora o coautora en un total de ocho publicaciones en revistas con sistema de arbitraje, seis de ellas constituyen la parte central de mi tesis doctoral y han sido presentadas en los Capítulos 7, 8, 9, 10 y 12. He sido la investigadora principal de los artículos de Cuadrado et al. (2015), Cuadrado et al. (2017) y Cuadrado et al. (2018, en preparación), llevando a cabo todo el análisis, modelado y redacción de los manuscritos (con excepción de los aspectos anteriormente mencionados). Los artículos de Müller et al. (2014) y Cuadrado et al. (2016), han sido realizados gracias a la contribución multidisciplinar de astrónomos, espectroscopistas y físicos teóricos. En el caso del artículo de Müller et al. (2014), mi principal contribución fue la detección por primera vez de las dos líneas de SH^+ en los datos del barrido espectral con IRAM-30m y sugerir que las frecuencias obtenidas en el laboratorio eran erróneas por ~ 15 MHz. Colaboré en la redacción de la primera propuesta de ALMA para observar este rango de frecuencias y confirmar la detección de estas dos líneas. Con el objetivo de probar la viabilidad de estas asignaciones, colaboramos con espectroscopistas de la Universidad de Colonia, quienes llevaron a cabo la corrección de los parámetros espectroscópicos y la determinación de las frecuencias de las líneas rotacionales del ion reactivo SH^+ a partir de nuestras observaciones. En el caso del artículo de Cuadrado et al. (2016), mi principal contribución fue la detección e identificación de varias líneas rotacionales de los conformeros trans- y cis-HCOOH en el barrido espectral de la Barra de Orión. Llevé a cabo las observaciones de las tres posiciones observadas de la Barra, realicé la reducción de los espectros, la identificación y análisis de las líneas espectrales (caracterización de las líneas, determinación de T_{rot} , N y abundancias, el análisis de *line stacking*, y todas las figuras y tablas relacionadas), así como la discusión los resultados, y la revisión y adaptación del texto a los estándares de la revista A&A. J. Cernicharo se dio cuenta de que estábamos posiblemente ante

la primera evidencia de un mecanismo de fotoisomerización en el medio interestelar y organizó toda la investigación. Los análisis relacionados con Orión KL y B1-b fueron realizados por B. Tercero. Todos los cálculos cuánticos *ab initio* (secciones eficaces de fluorescencia y probabilidades de que se produzca la isomerización) fueron realizados por O. Roncero y A. Aguado. J.R. Goicoechea llevó a cabo el resto del análisis (e.g. cálculo del flujo de fotones que produce la fotoisomerización $\text{cis} \leftrightarrow \text{trans}$, del número de fotoisomerizaciones $\text{trans} \rightarrow \text{cis}$ y $\text{cis} \rightarrow \text{trans}$ por segundo, etc.) y también puso en común todos los resultados y les dio sentido científico. He realizado las observaciones con el radiotelescopio IRAM-30m (mapas y barrido espectral) presentadas en Goicoechea, Pety, Cuadrado et al. (2016) y Goicoechea, Cuadrado et al. (2017), analizado todos los datos relativos a las observaciones del barrido espectral utilizados en estos artículos, participado en la discusión de los resultados y la revisión final del manuscrito.

Publicaciones

Hasta la fecha, los resultados obtenidos del análisis del barrido espectral de la Barra de Orión con IRAM-30m y de los cartografiados obtenidos con ALMA han dado lugar a la publicación de los siguientes artículos en revistas con sistema de arbitraje:

1. S. Cuadrado, J.R. Goicoechea, J. Cernicharo et al. “*Complex organic molecules in strongly UV-irradiated gas*”. Astronomy & Astrophysics. En prensa. arXiv:170506612C (2017).
2. J.R. Goicoechea, S. Cuadrado, J. Pety et al. “*Spatially resolved images of reactive ions in the Orion Bar*”. Astronomy & Astrophysics, 601, L9 (2017).
3. S. Cuadrado, J. Goicoechea, O. Roncero, et al. “*Trans-cis molecular photoswitching in interstellar space*”. Astronomy & Astrophysics, 596, L1, 10 pp. (2016).
4. J.R. Goicoechea, J. Pety, S. Cuadrado et al. “*Compression and ablation of the photo-irradiated molecular cloud the Orion Bar*”. Nature, 537, 207-209 (2016).
5. S. Cuadrado, J.R. Goicoechea, P. Pilleri et al. “*The chemistry and spatial distribution of small hydrocarbons in UV irradiated molecular clouds: the Orion Bar PDR*”. Astronomy & Astrophysics, 575, A82, 31 pp. (2015).
6. H. S. P. Müller, J.R. Goicoechea, [...], S. Cuadrado et al. “*Revised spectroscopic parameters of SH^+ from ALMA and IRAM 30 m observations*”. Astronomy & Astrophysics, 569, L5, 5 pp. (2014).
7. S. Cuadrado, J.R. Goicoechea, J. Cernicharo et al. “*The IRAM-30m millimeter line survey of the Orion Bar PDR*”. Astronomy & Astrophysics. En fase final de preparación.

La colaboración en otros proyectos de investigación no relacionados directamente con el tema principal de la tesis, han dado lugar a las siguientes publicaciones en revistas con sistema de arbitraje:

8. J.R. Goicoechea, L. Chavarría, [...], S. Cuadrado et al. “*Herschel far-infrared spectral-mapping of Orion BN/KL outflows: spatial distribution of excited CO, H₂O, OH, O and C⁺ in shocked gas*”. The Astrophysical Journal, 799, 1, 102, 17 pp. (2015a).
9. J.R. Goicoechea, D. Teyssier, [...], S. Cuadrado et al. “*Velocity-resolved [CII] Emission and [CII]/FIR Mapping along Orion with Herschel*”, The Astrophysical Journal, 812, 1, 75, 21 pp. (2015b).

Lista de Acrónimos

A&A	—	Astronomy and Astrophysics
ACA	—	Atacama Compact Array
AGB	—	Asymptotic Giant Branch
ALMA	—	Atacama Large Millimeter Array
APEX	—	Atacama Pathfinder EXperiment
AU	—	Astronomical Unit
CAB	—	Centro de AstroBiología
CDMS	—	Cologne Database for Molecular Spectroscopy
CLASS	—	Continuum and Line Analysis Single-dish Software
COM	—	Complex Organic Molecule
CR	—	Cosmic Ray
CSIC	—	Consejo Superior de Investigaciones Científicas
CSO	—	Caltech Submillimeter Observatory
DF	—	Dissociation Front
DIB	—	Diffuse Interstellar Band
DSB	—	Double Side Band
EMIR	—	Eight MIXer Receiver
ERC	—	European Research Council
FFTS	—	Fast Fourier Transform Spectrometer
FWHM	—	Full Width at Half Maximum
FUV	—	Far-UltraViolet
GILDAS	—	Grenoble Image and Line Data Analysis System
HIFI	—	Heterodyne Instrument for the Far-Infrared
HSO	—	Herschel Space Observatory
HST	—	Hubble Space Telescope
HPBW	—	Half Power Beam Width
ICMM	—	Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid
IF	—	Ionization Front
INTA	—	Instituto Nacional de Técnica Aeroespacial
IR	—	InfraRed
IRAC	—	InfraRed Array Camera
IRAM	—	Instituto de RadioAstronomía Milimétrica

IRC	—	InfraRed Catalog
ISM	—	InterStellar Medium
ISRF	—	InterStellar Radiation Field
JCMT	—	James Clerk Maxwell Telescope
JPL	—	Jet Propulsion Laboratory
KIDA	—	KInetic Database for Astrochemistry
LAMDA	—	Leiden Atomic and Molecular DAtabase
LO	—	Local Oscillator
LSB	—	Lower Side Band
LSR	—	Local Standard of Rest
LTE	—	Local Thermodynamic Equilibrium
LVG	—	Large Velocity Gradient
MADEx	—	MADrid molecular spectroscopy EXcitation code
MB	—	Main Beam
MIR	—	Mid-InfraRed
NASA	—	National Aeronautics and Space Administration
NIR	—	Near-InfraRed
NGC	—	New General Catalog
PAH	—	Polycyclic Aromatic Hydrocarbon
PdBI	—	Plateau de Bure Interferometer
PDR	—	PhotoDissociation Region
PES	—	Potential Energy Surface
rms	—	Root Mean Square
SOFIA	—	Stratospheric Observatory For Infrared Astronomy
SSB	—	Single Side Band
TMC	—	Taurus Molecular Cloud
UIB	—	Unidentified Infrared Band
USB	—	Upper Side Band
UV	—	UltraViolet
VESPA	—	VErsatile SPectrometer Array
VLT	—	Very Large Telescope
WILMA	—	WIde band Line Multiple Autocorrelator

Índice de figuras

1.1.	Representación del ciclo vital del medio interestelar	14
1.2.	Objetos interestelares	16
1.3.	Distribución de la radiación en función de la longitud de onda	18
1.4.	Campo magnético a lo largo del plano de la galaxia	19
1.5.	Mecanismo de calentamiento por efecto fotoeléctrico sobre granos de polvo y PAHs	20
1.6.	<i>Izda.</i> Curva de eficiencia del calentamiento por efecto fotoeléctrico en función del parámetro de ionización, γ . <i>Dcha.</i> Contribución al calentamiento por efecto fotoeléctrico del gas interestelar de PAHs y granos de polvo que contienen diferente número de átomos de carbono	21
1.7.	Variación de la tasa de calentamiento por átomo de hidrógeno en función de γ	22
1.8.	Esquema de los procesos de fluorescencia, fotodisociación y desexcitación colisional de la molécula de H_2 tras la absorción de un fotón FUV.	24
1.9.	Tasas de calentamiento (<i>izda.</i>) y enfriamiento (<i>dcha.</i>) para una PDR con $n_H = 1000 \text{ cm}^{-3}$ y $G_0 = 1000$ en unidades de Habing, en función de la extinción visual	27
2.1.	<i>Izda:</i> Estrellas más brillantes, principales nebulosas y cúmulos estelares en la constelación de Orión. <i>Dcha:</i> Asociación Estelar OB1 de Orión	30
2.2.	<i>Izda:</i> Tipo espectral, temperatura efectiva y luminosidad de las estrellas del Trapecio. <i>Dcha:</i> Imagen del cúmulo del Trapecio realizada con la cámara IR NICMOS del Telescopio Espacial Hubble	31
2.3.	Imágenes de varias nebulosas y objetos estelares dentro del Complejo de Orión	33
2.4.	<i>Izda:</i> Imagen de exposición profunda de las nebulosas Cabeza de Caballo, IC 434, NGC 2024 y NGC 2068. <i>Dcha:</i> Imagen en NIR de la Nebulosa Cabeza de Caballo realizada con el HST. <i>Centro:</i> Imagen en VIS de la Nebulosa Cabeza de Caballo realizada con el VLT	34
2.5.	<i>Centro:</i> Mapa de $^{13}\text{CO } J = 1 \rightarrow 0$ que muestra las nubes moleculares de Orión A y Orión B. <i>Izda:</i> Imagen compuesta de la emisión de CO, ^{13}CO y $\text{C}^{18}\text{O } J = 1 \rightarrow 0$ de Orión B. <i>Dcha:</i> Imagen de la emisión del polvo en continuo ($850 \mu\text{m}$) de las nubes moleculares gigantes OMC-1/2/3	35

2.6. <i>Izda.</i> : Imagen en múltiples longitudes de onda de la nube molecular gigante OMC–1. <i>Dcha.</i> : Mapa de OMC–1 de la intensidad integrada de la línea [CII]	37
2.7. Variedad de perfiles de las líneas de CO, C ⁺ y H ⁺ en la nube molecular OMC–1.	37
3.1. Esquema unidimensional de la estratificación de una PDR iluminada por un campo FUV intenso en función de la extinción visual	40
3.2. Representación del flujo de radiación FUV incidente, G_0 en función de la densidad de la nube, n	45
3.3. Modelos isobáricos de PDR en fase gas que muestran los gradientes de densidad y temperatura (dos paneles superiores) en función de la profundidad de la nube para una PDR con un campo de radiación FUV incidente de $\chi = 2 \times 10^4$. Los paneles inferiores muestran la contribución de los diferentes procesos de calentamiento (tercer panel) y enfriamiento (panel inferior) al balance energético.	46
3.4. Perfiles de abundancia de iones reactivos obtenidos con un modelo isobárico de una PDR	50
3.5. Esquemas de las reacciones más importantes de la química de hidrógeno, oxígeno, carbono, nitrógeno, azufre y silicio en una PDR	51
5.1. <i>Izda.</i> Imagen de la Barra de Orión iluminada por el cúmulo del Trapecio tomada con la cámara WFPC2 del HST. <i>Dcha.</i> Emisión en intensidad integrada de la línea C ¹⁸ O $J = 3 \rightarrow 2$ en la Barra de Orión	60
5.2. Transmisión atmosférica entre 60 – 400 GHz para dos valores de vapor de agua precipitable (2 mm y 4 mm)	63
5.3. Ejemplo de las líneas resueltas en velocidad en la Barra de Orión obtenidas con VESPA en la banda de 1 mm (HCO, HOC ⁺ y HCN con $J = 3 \rightarrow 2$) y 2 mm (CS $J = 3 \rightarrow 2$).	64
5.4. Efectos de la resolución espectral en líneas no resueltas.	65
5.5. <i>Izda.</i> : Tabla con las eficiencia frontales (F_{eff}), las eficiencias del haz (B_{eff}), y el tamaño del haz (HPBW) del telescopio IRAM-30m en función de la frecuencia. <i>Dcha.</i> : Ajuste polinómico de η_{MB} en función de la frecuencia	67
5.6. Barrido espectral en la región de fotodisociación de la Barra de Orión	69
5.7. Barrido espectral completo de la Barra de Orión realizado con el radiotelescopio IRAM-30m	71
5.8. Mapas del área integrada de línea (K km s ⁻¹) de las moléculas CO $3 \rightarrow 2$, ¹³ CO $3 \rightarrow 2$, HCO ⁺ $4 \rightarrow 3$, H ₂ CO $5_{1,5} \rightarrow 4_{1,4}$, HCN $3 \rightarrow 2$, HCN $4 \rightarrow 3$, C ₂ H $4 \rightarrow 3$ y SO $8_9 \rightarrow 7_8$	94
5.9. Mapas por canales de velocidad de las moléculas CO $3 \rightarrow 2$, ¹³ CO $3 \rightarrow 2$, C ¹⁸ O $3 \rightarrow 2$, HCO ⁺ $4 \rightarrow 3$, HCN $4 \rightarrow 3$, C ₂ H $4 \rightarrow 3$ y SO $8_9 \rightarrow 7_8$	96
5.10. Promedios verticales de la intensidad de línea integrada entre 0 – 20 km s ⁻¹ perpendiculares a la Barra de las moléculas CO $3 \rightarrow 2$, ¹³ CO $3 \rightarrow 2$, C ¹⁸ O $3 \rightarrow 2$, HCO ⁺ $4 \rightarrow 3$, H ₂ CO $5_{1,5} \rightarrow 4_{1,4}$, HCN $3 \rightarrow 2$, HCN $4 \rightarrow 3$, C ₂ H $4 \rightarrow 3$ y SO $8_9 \rightarrow 7_8$	99
6.1. Diagramas de rotación de las moléculas simples (diatómicas y triatómicas) detectadas en el frente de disociación de la Barra de Orión.	103

6.2. Densidades de columna (histograma verde; eje izquierdo) y temperaturas rotacionales (histograma rojo; eje derecho) de las moléculas simples detectadas en el frente de disociación de Barra de Orión.	107
6.3. Líneas detectadas de CO y de sus isotopólogos	108
6.4. Líneas detectadas de CN y de sus isotopólogos	108
6.5. Ejemplos de líneas detectadas de NO	109
6.6. Líneas detectadas de CS y de sus isotopólogos	109
6.7. Ejemplos de líneas detectadas de NS	110
6.8. Ejemplos de líneas detectadas de SiO	110
6.9. Líneas detectadas de SO y de sus isotopólogos	110
6.10. Ejemplos de líneas detectadas de SO ₂	111
6.11. Líneas detectadas de HCS ⁺	111
6.12. Líneas detectadas de HCO ⁺ y de sus isotopólogos	111
6.13. Líneas detectadas de HCN y de sus isotopólogos	112
6.14. Líneas detectadas de HNC y de sus isotopólogos	112
6.15. Líneas detectadas de OCS	112
6.16. Líneas detectadas de H ₂ S	112
6.17. Líneas detectadas de N ₂ H ⁺	112
7.1. Densidades de columna (histograma verde; eje izquierdo) y temperaturas rotacionales (histograma rojo; eje derecho) de los hidrocarburos detectados en el frente de disociación de Barra de Orión.	127
8.1. Densidades de columna (histograma verde; eje izquierdo) y temperaturas rotacionales (histograma rojo; eje derecho) de las moléculas orgánicas complejas (y precursores) detectadas en el frente de disociación de Barra de Orión.	163
9.1. <i>Panel Superior:</i> Secciones eficaces de fluorescencia estimadas mediante cálculos cuánticos <i>ab initio</i> . <i>Paneles Centrales:</i> Variación del número de fotones FUV entre 911 Å y 3000 Å, en unidades de fotón cm ⁻² s ⁻¹ Å ⁻¹ , en varias posiciones de la Barra de Orión con extinciones visuales crecientes. <i>Panel Inferior:</i> Curva de extinción del polvo en función de la longitud de onda. La extinción aumenta con el incremento de la abundancia de PAHs.	200
10.1. Diagrama de rotación del ion reactivo CO ⁺	213
10.2. Densidades de columna (histograma verde; eje izquierdo) y temperaturas rotacionales (histograma rojo; eje derecho) de los iones reactivos detectados en el frente de disociación de Barra de Orión.	214

10.3. Líneas detectadas de CO^+	234
10.4. Líneas detectadas de SH^+	234
10.5. Líneas detectadas de HOC^+	234
10.6. Líneas detectadas de SO^+	234
10.7. Líneas detectadas de CF^+	235
11.1. Espectro observado entre 85.66 – 85.7 GHz donde se aprecia la diferencia de anchura entre las líneas moleculares y de recombinación de carbono originadas en la PDR y las líneas de recombinación de hidrógeno y helio originadas en la región HII.	238
11.2. Diferencia en velocidades de las líneas de recombinación $\text{H41}\alpha$ y $\text{C41}\alpha$	238
11.3. Ejemplos de las líneas de recombinación detectadas hacia la posición de observación en la Barra de Orión.	242
12.1. Combinación de las imágenes de HCO^+ obtenidas con el interferómetro ALMA con la emisión extensa cartografiada con el radiotelescopio IRAM-30m.	244
A.1. Esquema de clasificación de las moléculas en trompos esféricos, simétricos y asimétricos en función de la simetría de la molécula.	268
A.2. Diagrama de niveles de energía de las moléculas trompo-simétricas achatadas (<i>izda.</i>) y alargadas (<i>dcha.</i>)	269
A.3. Diagrama de correlación para un trompo asimétrico.	271
C.1. Imagen del centro de la nebulosa de Orión en el infrarrojo (a 8 micras) tomada por la cámara IRAC a bordo del telescopio espacial Spitzer	299
C.2. El cometa Hale Bopp, donde también se ha detectado ácido fórmico	308

Índice de tablas

3.1. Parámetros estelares de estrellas tipo O y B.	41
3.2. Lista de los códigos de PDR más importantes	43
3.3. Principales reacciones químicas en fase gas en PDRs.	48
5.1. Frecuencias observadas y parámetros del telescopio.	68
5.2. Moléculas detectadas en el barrido espectral de la Barra de Orión.	70
6.1. Momento dipolar (μ), número de líneas detectadas, número de figura y tabla de las moléculas sencillas.	102
6.2. T_{rot} , N y abundancias inferidas en el frente de disociación de la Barra de Orión.	106
6.3. Parámetros de línea de la molécula CO y de sus isotopólogos.	113
6.4. Parámetros de línea de la molécula CN y de sus isotopólogos.	113
6.5. Parámetros de línea de la molécula NO $^2\Pi_{1/2} \rightarrow ^2\Pi_{1/2}$	115
6.6. Parámetros de línea de la molécula CS y de sus isotopólogos.	116
6.7. Parámetros de línea de la molécula NS ($^2\Pi_{1/2} \rightarrow ^2\Pi_{1/2}$).	116
6.8. Parámetros de línea de la molécula SiO.	117
6.9. Parámetros de línea de la molécula SO y de sus isotopólogos.	118
6.10. Parámetros de línea de la molécula SO ₂	119
6.11. Parámetros de línea del ion molecular HCO ⁺ y de sus isotopólogos.	120
6.12. Parámetros de línea del ion molecular HCS ⁺	120
6.13. Parámetros de línea de la molécula HCN y de sus isotopólogos.	121
6.14. Parámetros de línea de la molécula HNC y de sus isotopólogos.	121
6.15. Parámetros de línea de la molécula OCS.	122
6.16. Parámetros de línea de la molécula H ₂ S y de sus isotopólogos.	122

6.17. Parámetros de línea del ion molecular N_2H^+	122
10.1. Parámetros de línea del ion reactivo CO^+	235
10.2. Parámetros de línea del ion reactivo SH^+	235
10.3. Parámetros de línea del ion reactivo HOC^+	236
10.4. Parámetros de línea del ion reactivo $\text{SO}^+ \ ^2\Pi_{1/2} \rightarrow \ ^2\Pi_{1/2}$	236
10.5. Parámetros de línea del ion reactivo CF^+	236
11.1. Parámetros de línea de las líneas de recombinación de hidrógeno.	239
11.2. Parámetros de línea de las líneas de recombinación de helio.	240
11.3. Parámetros de línea de las líneas de recombinación de carbono.	241
A.1. Clasificación de las moléculas en función de sus momentos de inercia.	267
B.1. Líneas detectadas en el barrido espectral de la Barra de Orión	273

Bibliografía

Durante la redacción de los Capítulos de la Introducción se han consultado diversas fuentes, las cuales tratan de manera más exhaustiva y detallada las distintas áreas aquí presentadas. Además de las referencias citadas a lo largo de los Capítulos (ver listado a continuación), en las Secciones 1.1 y 1.2 he consultado la revisión de Ferrière (2001) sobre el medio interestelar; para la redacción de las Secciones 1.3 y 1.4 he seguido principalmente los libros de Tielens 2005 y Lequeux 2003; para el Capítulo 2 he consultado las revisiones de O'Dell 2001 y Bally 2008 sobre Orión.

- ▶ Abel, N. P., Federman, S. R., & Stancil, P. C. 2008, *ApJ*, 675, L81
- ▶ Abt, H. A., Wang, R., Cardona, O. 1991, *ApJ*, Part 1, 367, 155-161
- ▶ Agúndez, M., Cernicharo, J., & Goicoechea, J. R. 2008, *A&A*, 483, 831
- ▶ Agúndez, M., Cernicharo, J., Guélin, M., et al. 2008b, *A&A*, 478, L19
- ▶ Agúndez, M., Goicoechea, J. R., Cernicharo, J., Faure, A., & Roueff, E. 2010, *ApJ*, 713, 662
- ▶ Ahrens, V. & Winnewisser, G. 1999, *Zeitschrift Naturforschung Teil A*, 54, 131
- ▶ Aikawa, Y., Umembayashi, T., Nakano, T., Miyama, S. M. 1997, *ApJ*, 486, 1, L51-L54
- ▶ Aikawa, Y., van Zadelhoff, G. J., van Dishoeck, E. F., Herbst, E. 2002, *A&A*, 386, 622-632
- ▶ Aladro, R., Martín, S., Martín-Pintado, J., et al. 2011, *A&A*, 535, A84
- ▶ Alata, I., Cruz-Díaz, G. A., Muñoz Caro, G. M., & Dar-
tois, E. 2014, *A&A*, 569, A119
- ▶ Allegrini, M., Johns, J. W. C., & McKellar, A. R. W. 1979, *The Journal of Chemical Physics*, 70, 2829
- ▶ Allers, K. N., Jaffe, D. T., Lacy, J. H., Draine, B. T., & Richter, M. J. 2005, *ApJ*, 630, 368
- ▶ Alves, J., Bouy, H. 2012, *A&A*, 547, A97
- ▶ Amano, T. 2010, *ApJ*, 716, L1
- ▶ Amano, T., Hirota, E., & Morino, Y. 1967, *Journal of the Physical Society of Japan*, 22, 399
- ▶ Amano, T. & Maeda, A. 2000, *Journal of Molecular Spectroscopy*, 203, 140
- ▶ Amano, T., Saito, S., Hirota, E., & Morino, Y. 1969, *Journal of Molecular Spectroscopy*, 32, 97
- ▶ Amano, T. & Zelinger, Z. 2002, *Journal of Molecular Spectroscopy*, 211, 273
- ▶ Andree-Labsch, S., Ossenkopf-Okada, V., & Röllig, M. 2017, *A&A*, 598, A2
- ▶ Anttila, R., Horneman, V. M., Koivusaari, M., & Paso, R. 1993, *Journal of Molecular Spectroscopy*, 157, 198
- ▶ Apponi, A. J., Pesch, T. C., & Ziurys, L. M. 1999, *ApJ*, 519, L89
- ▶ Arab, H., Abergel, A., Habart, E., et al. 2012, *A&A*, 541, A19
- ▶ Asplund, M., Grevesse, N., & Sauval, A. J. 2005, in *Cosmic Abundances as Records of Stellar Evolution and Nucleosynthesis*, eds. T. G. Barnes, III, & F. N. Bash, ASP

- Conf. Ser., 336, 25
- Asvany, O., Ricken, O., Müller, H. S. P., et al. 2008, *Phys. Rev. Lett.*, 100, 233004
 - Austin, J. A., Levy, D. H., Gottlieb, C. A., & Radford, H. E. 1974, *J. Chem. Phys.*, 60, 207
 - Avery, L. W., Broten, N. W., MacLeod, J. M., Oka, T., & Kroto, H. W. 1976, *ApJ*, 205, L173
 - Bachiller, R. & Pérez Gutiérrez, M. 1997, *ApJ*, 487, L93
 - Bacmann, A. & Faure, A. 2016, *A&A*, 587, A130
 - Bacmann, A., Taquet, V., Faure, A., Kahane, C., & Ceccarelli, C. 2012, *A&A*, 541, L12
 - Bakes, E. L. O. & Tielens, A. G. G. M. 1994, *ApJ*, Part 1, 427, 2, 822-838
 - Bally, J. & Reipurth, B. 2001, *ApJ*, 546, 1, 299-323
 - Bally, J. 2008, "Overview of the Orion Complex", *Handbook of Star Forming Regions*, ASP Conference Series, Vol. 1, Bo Reipurth, ed.
 - Barlow, M. J., Swinyard, B. M., Owen, P. J., et al. 2013, *Science*, 342, 1343
 - Batrla, W. & Wilson, T. L. 2003, *A&A*, 408, 231
 - Baulch, D. L. 2005, *J. Phys. Chem. Ref. Data*, 34, 757
 - Beaty-Travis, L. M., Moule, D. C., Lim, E. C., & Judge, R. H. 2002, *J. Chem. Phys.*, 117, 4831
 - Bechtel, H. A., Steeves, A. H., & Field, R. W. 2006, *ApJ*, 649, L53
 - Beers, Y., Klein, G. P., Kirchhoff, W. H., & Johnson, D. R. 1972, *Journal of Molecular Spectroscopy*, 44, 553
 - Bell, M. B., Matthews, H. E., & Sears, T. J. 1983, *A&A*, 127, 241
 - Bell, M. B., Sears, T. J., & Matthews, H. E. 1982, *ApJ*, 255, L75
 - Belloche, A., Garrod, R. T., Müller, H. S. P., et al. 2009, *A&A*, 499, 215
 - Belloche, A., Garrod, R. T., Müller, H. S. P., & Menten, K. M. 2014, *Science*, 345, 1584
 - Belov, S. P., Tretiakov, M. I., & Suenram, R. D. 1992, *ApJ*, 393, 848
 - Belov, S. P., Yamada, K. M. T., Winnewisser, G., et al. 1995, *Journal of Molecular Spectroscopy*, 173, 380
 - Benz, A. O., Bruderer, S., van Dishoeck, E. F., et al. 2010, *A&A*, 521, L35
 - Benz, A. O., Bruderer, S., van Dishoeck, E. F., et al. 2016, *A&A*, 590, A105
 - Bergin, E. A., Aikawa, Y., Blake, G. A., van Dishoeck, E. F. 2007, *Protostars and Planets V*, B. Reipurth, D. Jewitt, and K. Keil (eds.), University of Arizona Press, Tucson, 751-766
 - Bernard-Salas, J., Habart, E., Arab, H., et al. 2012, *A&A*, 538, A37
 - Berné, O., Fuente, A., Goicoechea, J. R., et al. 2009, *ApJ*, 706, L160
 - Berné, O., Marcelino, N. & Cernicharo, J. 2010, 466, 947
 - Bertin, M., Romanzin, C., Doronin, M., et al. 2016, *ApJ*, 817, L12
 - Bertoldi, F. & Draine, B. T. 1996, *ApJ*, 458, 222
 - Bertoldi, F. 1997, *ESA Special Publication* 419
 - Bissantz, H., Andric, L., Hertzler, C., Foth, H.-J., & Linder, F. 1992, *Z. Phys. D Atoms Molecules Clusters*, 22, 727
 - Bisschop, S. E., Jørgensen, J. K., van Dishoeck, E. F., & de Wachter, E. B. M. 2007, *A&A*, 465, 913
 - Blaauw, A. 1964, *Annual Review of A&A*, 2, 213
 - Blaauw, A. 1991 'OB Associations and the Fossil Record of Star Formation' in *The Physics of Star Formation and Early Stellar Evolution* NATO Advanced Science Institutes (ASI) Series C, edited by Charles J. Lada and Nikolaos D. Kylafis, 342, 125
 - Black, J. H. 1998, *Faraday Discussions*, 109, 257
 - Black, J. H., & van Dishoeck, E. F. 1987, *ApJ*, 322, 412

- ▶ Blackman, G. L., Brown, R. D., Godfrey, P. D., & Gunn, H. I. 1976, *Nature*, 261, 395
- ▶ Blake, G. A., Sastry, K. V. L. N., & de Lucia, F. C. 1984, *J. Chem. Phys.*, 80, 95
- ▶ Blake, G. A., Sutton, E. C., Masson, C. R., & Phillips, T. G. 1987, *ApJ*, 315, 621
- ▶ Bockelée-Morvan, D., Crovisier, J., Mumma, M. J., & Weaver, H. A. 2004, *The composition of cometary volatiles. Comets II* (University of Arizona Press), 391–423
- ▶ Bockelée-Morvan, D., Lis, D. C., Wink, J. E., et al. 2000, *A&A*, 353, 1101
- ▶ Bocquet, R., Demaison, J., Poteau, L., et al. 1996, *Journal of Molecular Spectroscopy*, 177, 154
- ▶ Bogey, M., Civis, S., Delcroix, B., et al. 1997, *Journal of Molecular Spectroscopy*, 182, 85
- ▶ Bogey, M., Demuynck, C., & Destombes, J. L. 1982a, *Journal of Molecular Spectroscopy*, 95, 35
- ▶ Bogey, M., Demuynck, C., & Destombes, J. L. 1982b, *Chemical Physics*, 66, 99
- ▶ Bogey, M., Demuynck, C., Destombes, J. L., & Lapauw, J. M. 1986, *Journal of Physics E Scientific Instruments*, 19, 520
- ▶ Botschwina, P. & Sebald, P. 1985, *Journal of Molecular Spectroscopy*, 110, 1
- ▶ Botschwina, P., Stein, C., Sebald, P., Schröder, B., & Oswald, R. 2014, *ApJ*, 787, 72
- ▶ Bottinelli, S., Ceccarelli, C., Lefloch, B., et al. 2004, *ApJ*, 615, 354
- ▶ Boucher, D., Burie, J., Demaison, J., et al. 1977, *Journal of Molecular Spectroscopy*, 64, 290
- ▶ Bouy, H., Alves, J., Bertin, E., Sarro, L. M., Barrado, D., 2014, *A&A*, 564, A29
- ▶ Bowater, I. C., Brown, J. M., & Carrington, A. 1971, *J. Chem. Phys.*, 54, 4957
- ▶ Briceño, C. 2008, “The Dispersed Young Population in Orion”, *Handbook of Star Forming Regions Vol. I Astronomical Society of the Pacific*, Bo Reipurth, ed.
- ▶ Briceño, C., Hartmann, L., Hernández, J., et al. 2007, *ApJ*, 661, 1119
- ▶ Briscoe, J. F., & Moore, C. B. 1993, *Meteoritics*, 28, 330
- ▶ Brogan, C. L., Troland, T. H., Abel, N. P., Goss, W.M. & Crutcher, R. M. 2005, *ASP Conference Series 343*, *Astronomical Society of the Pacific*, 183–184
- ▶ Brouard, M., & Wang, J.-X. 1992, *J. Chem. Soc. Faraday Trans.*, 88, 3511
- ▶ Brown, A. G. A., de Geus, E. J., de Zeeuw, P. T. 1994, *A&*, 289, 1, 101-120
- ▶ Brown, J. M., & Müller, H. S. P. 2009, *J. Mol. Spectrosc.*, 255, 68
- ▶ Brown, P. R., Davies, P. B., & Johnson, S. A. 1986, *Chem. Phys. Lett.*, 132, 582
- ▶ Brown, R. D., Crofts, J. G., Godfrey, P. D., et al. 1975, *ApJ*, 197, L29
- ▶ Brown, R. D., Godfrey, P. D., McNaughton, D., Pierlot, A. P., & Taylor, W. H. 1990, *Journal of Molecular Spectroscopy*, 140, 340
- ▶ Burke, J. R., Hollenbach, D. J. 1983, *ApJ*, Part 1, 265, 223-234
- ▶ Burton, M. G., Hollenbach, D. J., & Tielens, A. G. G. M. 1990, *ApJ*, 365, 620
- ▶ Brown, A. G. A., de Geus, E. J. & de Zeeuw, P. T. 1995, *A&A*, 289, 101
- ▶ Brünken, S., Fuchs, U., Lewen, F., et al. 2004, *Journal of Molecular Spectroscopy*, 225, 152
- ▶ Brünken, S., Kluge, L., Stoffels, A., Asvany, O., & Schlemmer, S. 2014, *ApJ*, 783, L4
- ▶ Brünken, S., Müller, H. S. P., Lewen, F., & Winnewisser, G. 2003, *Physical Chemistry Chemical Physics (Incorporating Faraday Transactions)*, 5
- ▶ Brünken, S., Müller, H. S. P., Thorwirth, S., Lewen, F., & Winnewisser, G. 2006, *Journal of Molecular Structure*,

780

- Buffa, G., Dore, L., Tinti, F., & Meuwly, M. 2006, *ChemPhysChem*, 7, 1764
- Buffa, G., Tarrini, O., Cazzoli, G., & Dore, L. 1994, *Phys. Rev. A*, 49, 3557
- Burton, M. G., Hollenbach, D. J., & Tielens, A. G. G. M. 1990, *ApJ*, 365, 620
- Cardelli, J. A., Clayton, G. C., & Mathis, J. S. 1989, *ApJ*, 345, 245
- Caselli, P. & Ceccarelli, C. 2012, *A&A Rev.*, 20, 56
- Castor, J. I. 1970, *MNRAS*, 149, 111
- Cazaux, S., Tielens, A. G. G. M., Ceccarelli, C., et al. 2003, *ApJ*, 593, L51
- Cazzoli, G., Cludi, L., Buffa, G., & Puzzarini, C. 2012, *ApJS*, 203, 11
- Cazzoli, G., Cludi, L., Cotti, G., Esposti, C. D., & Dore, L. 1994, *Journal of Molecular Spectroscopy*, 167, 468
- Cazzoli, G., Cludi, L., Puzzarini, C., & Gauss, J. 2010, *A&A*, 509, A1
- Cazzoli, G. & Puzzarini, C. 2005, *Journal of Molecular Spectroscopy*, 233, 280
- Cazzoli, G. & Puzzarini, C. 2006, *Journal of Molecular Spectroscopy*, 240, 153
- Cazzoli, G., Puzzarini, C., & Gauss, J. 2005, *ApJS*, 159, 181
- Cazzoli, G., Puzzarini, C., Stopkiewicz, S., & Gauss, J. 2010, *A&A*, 520, A64
- Cernicharo, J. 2004, *ApJ*, 608, L41
- Cernicharo, J. 2012, in *EAS Publications Series*, Vol. 58, *EAS Publications Series*, 251–261
- Cernicharo, J. 2012, in *Proc. of the European Conference on Laboratory Astrophysics*, eds. C. Stehleé, C. Joblin, & L. d’Hendecourt, *Eur. Astron. Soc. Publ. Ser.*, 4
- Cernicharo, J., Bachiller, R., & Duvert, G. 1986, *A&A*, 160, 181
- Cernicharo, J., Cox, P., Fossé, D., & Güsten, R. 1999, *A&A*, 351, 341
- Cernicharo, J., Gottlieb, C. A., Guelin, M., et al. 1991a, *ApJ*, 368, L39
- Cernicharo, J., Gottlieb, C. A., Guelin, M., et al. 1991b, *ApJ*, 368, L43
- Cernicharo, J., & Guelin, M. 1996, *A&A*, 309, L27
- Cernicharo, J., Guelin, M., & Askne, J. 1984, *A&A*, 138, 371
- Cernicharo, J., Guélin, M., & Kahane, C. 2000, *A&AS*, 142, 181
- Cernicharo, J., Guelin, M., Menten, K. M., & Walmsley, C. M. 1987, *A&A*, 181, L1
- Cernicharo, J., Heras, A. M., Tielens, A. G. G. M., et al. 2001, *ApJ*, 546, L123
- Cernicharo, J., Kisiel, Z., Tercero, B., et al. 2016, *A&A*, 587, L4
- Cernicharo, J., Liu, X.-W., González-Alfonso, E., et al. 1997, *ApJ*, 483, L65
- Cernicharo, J., Marcelino, N., Roueff, E., et al. 2012, *ApJ*, 759, L43
- Chabot, M., Béroff, K., Gratier, P., Jallat, A., & Wakeham, V. 2013, *ApJ*, 771, 90
- Chandra, S., & Kegel, W. H. 2000, *A&AS*, 142, 113
- Chen, W., Bocquet, R., Wlodarczak, G., & Boucher, D. 1991, *International Journal of Infrared and Millimeter Waves*, 12, 987
- Cho, S.-H. & Saito, S. 1998, *ApJ*, 496, L51
- Choi, Y., van der Tak, F. F. S., Bergin, E. A., & Plume, R. 2014, *A&A*, 572, L10
- Civiš, S., Blom, C. E., & Jensen, P. 1989, *J. Mol. Spectrosc.*, 138, 69
- Clark, W. W. & De Lucia, F. C. 1976, *Journal of Molecular Spectroscopy*, 60, 332
- Codella, C., Fontani, F., Ceccarelli, C., et al. 2015, *MN-*

RAS, 449, L11

► Collings, M. P., Anderson, M. A., Chen, R., et al. 2004, MNRAS, 354, 1133

► Combes, F., Boulanger, F., Encrenaz, P. J., et al. 1985, A&A, 147, L25

ç ► Compiègne, M., Abergel, A., Verstraete, L., et al. 2007, A&A, 471, 1, 205-212

► Coutens, A., Vastel, C., Caux, E., et al. 2012, A&A, 539, A132

► Creswell, R. A., Pearson, E. F., Winnewisser, M., & Winnewisser, G. 1976, Zeitschrift Naturforschung Teil A, 31, 221

► Creswell, R. A., Winnewisser, G., & Gerry, M. C. L. 1977, Journal of Molecular Spectroscopy, 65, 420

► Crockett, N. R., Bergin, E. A., Neill, J. L., et al. 2014, ApJ, 787, 112

► Cronin, J. R. & Chang, S. 1993, in NATO Advanced Science Institutes (ASI) Series C, Vol. 416, NATO Advanced Science Institutes (ASI) Series C, ed. J. M. Greenberg, C. X. Mendoza-Gómez, & V. Pirronello, 209–258

► Cruz-Díaz, G. A., Martín-Doménech, R., Muñoz Caro, G. M., & Chen, Y.-J. 2016, A&A, 592, A68

► Cuadrado, S., Goicoechea, J. R., Pilleri, P., et al. 2015, A&A, 575, A82

► Cuadrado, S., Goicoechea, J. R., Roncero, O., et al. 2016, A&A, 596, L1

► Dalgarno, A., Stephens, T. L. 1970, ApJ, 160, L107

► De Beck, E., Lombaert, R., Agúndez, M., et al. 2012, A&A, 539, A108

► de Jong, T., Boland, W., Dalgarno, A. 1980, A&A, 91, 1-2, 68-84

► de Zafra, R. L. 1971, ApJ, 170, 165

► DeFrees, D. J., & McLean, A. D. 1986, ApJ, 308, L31

► d'Hendecourt, L. B., Leger, A. 1987, A&A, 180, 1-2, L9-L12

► DeLeon, R. L. & Muentert, J. S. 1984, J. Chem. Phys., 80, 3992

► DeLeon, R. L. & Muentert, J. S. 1985, J. Chem. Phys., 82, 1702

► Dickinson, D. F. 1972, Astrophys. Lett., 12, 235

► Dore, L., Bizzocchi, L., & Degli Esposti, C. 2012, A&A, 544, A19

► Dore, L., Bizzocchi, L., Degli Esposti, C., & Gauss, J. 2010, Journal of Molecular Spectroscopy, 263, 44

► Draine, B. T. 1978, ApJS, 36, 595

► Draine, B. T. 2003, ARA&A, 41, 241

► Draine, B. T. Princeton Univ. Press, 2011

► Draine, B. T., Roberge, W. G., & Dalgarno, A. 1983, ApJ, 264, 485

► Duley, W. W., & Williams, D. A. 1983, MNRAS, 205, 67

► Dullemond, C. P., Hollenbach, D., Kamp, I., D'Alessio, P. 2007, Protostars and Planets V, B. Reipurth, D. Jewitt, and K. Keil (eds.), University of Arizona Press, Tucson, 555-572

► Dykstra, C. E., Parsons, C. A., & Oates, C. L. 1979, J. Am. Chem. Soc., 101, 1962

► Ebenstein, W. L. & Muentert, J. S. 1984, J. Chem. Phys., 80, 3989

► Einstein, A. 1905, Annalen der Physik, 322, 6, 132-148

► Eliet, S., Cuisset, A., Guinet, M., et al. 2012, Journal of Molecular Spectroscopy, 279, 12

► Elmegreen, B. G. & Lada, C. J. 1977, ApJ, 214, 725

► Esplugues, G. B., Cazaux, S., Meijerink, R., Spaans, M., & Caselli, P. 2016, A&A, 591, A52

► Etxaluze, M., Goicoechea, J. R., Cernicharo, J., et al. 2013, A&A, 556, A137

► Fabricant, B., Krieger, D., & Muentert, J. S. 1977, J. Chem. Phys., 67, 1576

- Federrath, C. & Klessen, R. S. 2013, *ApJ*, 763, 51
- Field, G. B., Somerville, W. B., Dressler, K., 1966, *Annual Review of A&*, 4, 207
- Flower, D. R. 1999, *MNRAS*, 305, 651
- Fortenberry, R. C., Huang, X., Crawford, T. D., & Lee, T. J. 2013, *ApJ*, 772, 39
- Fossé, D., Cernicharo, J., Gerin, M., & Cox, P. 2001, *ApJ*, 552, 168
- Fossé, D., Cesarsky, D., Gerin, M., Lequeux, J., & Tiné, S. 2000, in *ISO Beyond the Peaks: The 2nd ISO Workshop on Analytical Spectroscopy*, eds. A. Salama, M. F. Kessler, K. Leech, & B. Schulz, *ESA SP*, 456, 91
- Fuente, A., García-Burillo, S., Gerin, M., et al. 2005, *ApJ*, 619, L155
- Fuente, A., García-Burillo, S., Usero, A., et al. 2008, *A&A*, 492, 675
- Fuente, A., Martín-Pintado, J., Cernicharo, J., & Bachiller, R. 1993, *A&A*, 276, 473
- Fuente, A., Rodríguez-Franco, A., García-Burillo, S., Martín-Pintado, J., & Black, J. H. 2003, *A&A*, 406, 899
- Fuente, A., Rodríguez-Franco, A., & Martín-Pintado, J. 1996, *A&A*, 312, 599
- Furuya, K., Aikawa, Y., Sakai, N., & Yamamoto, S. 2011, *ApJ*, 731, 38
- Gadhi, J., Lahrouni, A., Legrand, J., & Demaison, J. 1995, *Journal de chimie physique*, 92, 1984
- Gail, H.-P., Keller, R., Sedlmayr, E. 1984, *A&A*, 133, 2, 320-332
- García-Segura, G. & Franco, J. 1996, *ApJ*, 469, 171
- Garrod, R. T., Widicus Weaver, S. L., & Herbst, E. 2008, *ApJ*, 682, 283
- Gehr, R. D. 1989, “Sources of stardust in the Galaxy”, in *Interstellar Dust*, ed. L. J. Allamandola & A. G. G. M. Tielens, (Kluwer Academic Publishers Group, Dordrecht), 445
- Gendriesch, R., Lewen, F., Klapper, G., et al. 2009, *A&A*, 497, 927
- Genzel, R. & Stutzki, J. 1989, *Annu. Rev. A&A*, 27, 41
- Gerin, M., Goicoechea, J. R., Pety, J., & Hily-Blant, P. 2009, *A&A*, 494, 977
- Gerin, M., Kázmierczak, M., Jastrzebska, M., et al. 2011, *A&A*, 525, A116
- Gerin, M., Neufeld, D. A., & Goicoechea, J. R. 2016, *ARA&A*, 54, 181
- Gerin, M., Pety, J., Fuente, A., et al. 2015, *A&A*, 577, L2
- Gibb, A. G. 2008, “Star Formation in NGC 2068, NGC 2071, and Northern L1630”, *Handbook of Star Forming Regions*, *ASP Conference Series*, Vol. 4, Bo Reipurth, ed. 693
- Gibb, E. L., Whittet, D. C. B., Schutte, W. A., et al. 2000, *ApJ*, 536, 347
- Ginard, D., González-García, M., Fuente, A., et al. 2012, *A&A*, 543, A27
- Godard, B., & Cernicharo, J. 2013, *A&A*, 550, A8
- Godard, B., Falgarone, E., Gerin, M., et al. 2012, *A&A*, 540, A87
- Goicoechea, J. R., Compiègne, M., & Habart, E. 2009, *ApJ*, 699, L165
- Goicoechea, J. R., Cuadrado, S., Pety, J., & et al. 2017, *A&A*, 601, L9
- Goicoechea, J. R., Joblin, C., Contursi, A., et al. 2011, *A&A*, 530, L16
- Goicoechea, J. R. & Le Bourlot, J. 2007, *A&A*, 467, 1
- Goicoechea, J. R., Pety, J., Cuadrado, S., et al. 2016, *Nature*, 537, 207
- Goicoechea, J. R., Pety, J., Gerin, M., et al. 2006, *A&A*, 456, 565
- Goicoechea, J. R., Pety, J., Gerin, M., et al. 2009, *A&A*, 498, 771

- ▶ Goicoechea, J. R., Pety, J., Gerin, M., Hily-Blant, P., & Le Bourlot, J. 2009, *A&A*, 498, 771
- ▶ Goicoechea, J. R., Rodríguez-Fernández, N. J., & Cernicharo, J. 2004, *ApJ*, 600, 214
- ▶ Goicoechea, J. R., Teyssier, D., Etxaluze, M., et al. 2015, *ApJ*, 812, 75
- ▶ Goldsmith, D. W., Habing, H. J., Field, G. B. 1969, *ApJ*, 158, 173
- ▶ Goldsmith, P. F. & Langer, W. D. 1999, *ApJ*, 517, 209
- ▶ Golubiatnikov, G. Y., Lapinov, A. V., Guarnieri, A., & Knöchel, R. 2005, *Journal of Molecular Spectroscopy*, 234, 190
- ▶ Gomez, M., Lada, C. J. 1998, *ApJ*, 115, 4, 1524-1535
- ▶ Goorvitch, D. 1994, *ApJS*, 95, 535
- ▶ Gottlieb, C. A. 1973, in *Molecules in the Galactic Environment*, ed. M. A.
- ▶ Gottlieb, C. A., Gottlieb, E. W., & Thaddeus, P. 1983a, *ApJ*, 264, 740
- ▶ Gottlieb, C. A., Gottlieb, E. W., Thaddeus, P., & Kawamura, H. 1983b, *ApJ*, 275, 916
- ▶ Gottlieb, C. A., Gottlieb, E. W., Thaddeus, P., & Vrtilek, J. M. 1986, *ApJ*, 303, 446
- ▶ Gottlieb, C. A., Myers, P. C., & Thaddeus, P. 2003, *ApJ*, 588, 655
- ▶ Gottlieb, C. A., Vrtilek, J. M., Gottlieb, E. W., Thaddeus, P., & Hjalmarson, A. 1985, *ApJ*, 294, L55
- ▶ Gordon & L. E. Snyder, 181
- ▶ Gorti, U. & Hollenbach, D. J. 2002, *ApJ*, 573, 215
- ▶ Gratier, P., Pety, J., Guzmán, V., et al. 2013, *A&A*, 557, A101
- ▶ Green, S. 1986, *ApJ*, 309, 331
- ▶ Green, S. 1991, *ApJS*, 76, 979
- ▶ Greve, A., Kramer, C., & Wild, W. 1998, *A&AS*, 133, 271
- ▶ Guelin, M., Green, S., & Thaddeus, P. 1978, *ApJ*, 224, L27
- ▶ Guelin, M., Friberg, P., & Mezaoui, A. 1982, *A&A*, 109, 23
- ▶ Guelin, M., Cernicharo, J., Kahane, C., Gomez-Gonzalez, J., & Walmsley, C. M. 1987, *A&A*, 175, L5
- ▶ Guelin, M., Cernicharo, J., Travers, M. J., et al. 1997, *A&A*, 317, L1
- ▶ Gupta, H., Rimmer, P., Pearson, J. C., et al. 2010, *A&A*, 521, L47
- ▶ Guzmán, V., Pety, J., Gratier, P., et al. 2012, *A&A*, 543, L1
- ▶ Guzmán, V., Pety, J., Goicoechea, J. R., Gerin, M., & Roueff, E. 2011, *A&A*, 534, A49
- ▶ Guzmán, V. V., Goicoechea, J. R., Pety, J., et al. 2013, *A&A*, 560, A73
- ▶ Guzmán, V. V., Pety, J., Goicoechea, J. R., et al. 2015, *ApJ*, 800, L33
- ▶ Guzmán, V. V., Pety, J., Gratier, P., et al. 2014, *Faraday Discussions*, 168, 103
- ▶ Habart, E., Abergel, A., Walmsley, C. M., et al. 2005, *A&A*, 437, 1, 177-188
- ▶ Habart, E., Dartois, E., Abergel, A., et al. 2010, *A&A*, 518, L116
- ▶ Hansen, N., Andresen, U., Dreizler, H., et al. 1998, *Chemical Physics Letters*, 289, 311
- ▶ Harper, Gr. M., Brown, A., Guinan, E. F. 2008, *ApJ*, 135, 4, 1430-1440
- ▶ Havenith, M., Zwart, E., Leo Meerts, W., & Ter Meulen, J. J. 1990, *J. Chem. Phys.*, 93, 8446
- ▶ He, H.-Y., & Fang, W.-H. 2003, *J. Am. Chem. Soc.*, 125, 16139
- ▶ Hennebelle, P. & Falgarone, E. 2012, *A&A, Rev.* 20, 55
- ▶ Herbst, E. 2015, in *European Physical Journal Web of Conferences*, Vol. 84, European Physical Journal Web of

Conferences, 06002

- ▶ Herbst, E. & van Dishoeck, E. F. 2009, *ARA&A*, 47, 427
- ▶ Hierl, P. M., Morris, R. A., & Viggiano, A. A. 1997, *J. Chem. Phys.*, 106, 10145
- ▶ Hill, J. K. & Hollenbach, D. J. 1978, *ApJ*, 225, 390
- ▶ Hillenbrand, L. A. 1997, *ApJ*, 113, 1733-1768
- ▶ Hillenbrand, L. A., Hartmann, L. W. 1998, *ApJ*, 492, 2, 540-553
- ▶ Hirano, N., Kamazaki, T., Mikami, H., Ohashi, N., & Umemoto, T. 1999, in *Star Formation 1999*, ed. T. Nakamoto, 181–182
- ▶ Hirota, T., Bushimata, T., Choi, Y. K., et al. 2007, *Publications of the Astronomical Society of Japan*, 59, 897
- ▶ Hocking, W. H., Gerry, M. C. L., & Winnewisser, G. 1975, *Canadian Journal of Physics*, 53, 1869
- ▶ Hogerheijde, M. R., Jansen, D. J., & van Dishoeck, E. F. 1995, *A&A*, 294, 792
- ▶ Hollenbach, D., 1989, *Interstellar Dust: Proceedings of the 135th Symposium of the International Astronomical Union*, Edited by Louis J. Allamandola and A. G. G. M. Tielens. International Astronomical Union. Symposium no. 135, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 227
- ▶ Hollenbach, D., Kaufman, M. J., Bergin, E. A., & Melnick, G. J. 2009, *ApJ*, 690, 1497
- ▶ Hollenbach, D., McKee, C. F., 1979, *ApJ Supplement Series*, 41, 555-592
- ▶ Hollenbach, D. J. & Natta, A. 1995, *ApJ*, 455, 133
- ▶ Hollenbach, David, Salpeter, E. E, 1969, *Bulletin of the American Astronomical Society*, 1, 244
- ▶ Hollenbach, D. J., Takahashi, T., Tielens, A. G. G. M. 1991, *ApJ*, Part 1, 377, 192-209
- ▶ Hollenbach, D. J., & Tielens, A. G. G. M. 1999, *Rev. Mod. Phys.*, 71, 173
- ▶ Hirao, T., Yu, S., & Amano, T. 2008, *J. Mol. Spectrosc.*, 248, 26
- ▶ Hocking, W. H. 1976, *Zeitschrift Naturforschung Teil A*, 31, 1113
- ▶ Hogerheijde, M. R., Jansen, D. J., & van Dishoeck, E. F. 1995, *A&A*, 294, 792
- ▶ Hosokawa, T. & Inutsuka, S.-i. 2006, *ApJ*, 646, 240
- ▶ Hovde, D. C., & Saykally, R. J. 1987, *J. Chem. Phys.*, 87, 4332
- ▶ Hunter, D. A., Watson, W. D. 1978, *ApJ*, Part 1, 226, 477-482
- ▶ Inutsuka, S.-i. & Miyama, S. M. 1997, *ApJ*, 480, 681
- ▶ Ikeda, M., Ohashi, M., Nummelin, A., et al. 2001, *ApJ*, 560, 792
- ▶ Ioannoni, F., Moule, D. C., & Clouthier, D. J. 1990, *J. Phys. Chem.*, 94, 2290
- ▶ Jansen, D. J., Spaans, M., Hogerheijde, M. R., & van Dishoeck, E. F. 1995, *A&A*, 303, 541
- ▶ Joblin, C., Leger, A., & Martin, P. 1992, *ApJ*, 393, L79
- ▶ Joblin, C., Pilleri, P., Montillaud, J., et al. 2010, *A&A*, 521, L25
- ▶ Johns, J. W. C., Nemes, L., Yamada, K. M. T., et al. 1992, *Journal of Molecular Spectroscopy*, 156, 501
- ▶ Johnson, D. R., Powell, F. X., & Kirchhoff, W. H. 1971, *Journal of Molecular Spectroscopy*, 39, 136
- ▶ Johnson, H. R. & Strandberg, M. W. P. 1952, *J. Chem. Phys.*, 20, 687
- ▶ Jørgensen, J. K., Harvey, P. M., Evans, II, N. J., et al. 2006, *ApJ*, 645, 1246
- ▶ Jura, M. 1976, *ApJ*, 204, 1, 12-20
- ▶ Kanata, H., Yamamoto, S., & Saito, S. 1987, *Chem. Phys. Lett.*, 140, 2217
- ▶ Kaplan, K. F., Dinerstein, H. L., Oh, H., et al. 2017, *ApJ*, 838, 2

- Keane, J. V., Tielens, A. G. G. M., Boogert, A. C. A., Schutte, W. A., & Whittet, D. C. B. 2001, *A&A*, 376, 254
- Kim, E. & Yamamoto, S. 2003, *Journal of Molecular Spectroscopy*, 219, 296
- Kirchhoff, W. H., Johnson, D. R., & Lovas, F. J. 1973, *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, 2, 1
- Klaus, T., Belov, S. P., Saleck, A. H., Winnewisser, G., & Herbst, E. 1994, *Journal of Molecular Spectroscopy*, 168, 235
- Klaus, T., Saleck, A. H., Belov, S. P., et al. 1996, *Journal of Molecular Spectroscopy*, 180, 197
- Kleinmann, D. E. & Low, F. J. 1967, *ApJ Let.* 149, L1
- Kleiner, I., Lovas, F. J., & Godefroid, M. 1996, *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, 25, 1113
- Knapp, G. R. & Morris, M. 1985, *ApJ*, 292, 640
- Kukolich, S., Nelson, A., & Yamanashi, B. 1971, *Journal of the American Chemical Society*, 93, 6769
- Kukolich, S. G. 1982, *J. Chem. Phys.*, 76, 97
- Kukolich, S. G., Ruben, D. J., Wang, J. H. S., & Williams, J. R. 1973, *J. Chem. Phys.*, 58, 3155
- Kutner, M. L., Tucker, K. D., Chin, G. & Thaddeus, P. 1977, *ApJ*, 215, 521
- Kuze, H., Kuga, T., & Shimizu, T. 1982, *J. Mol. Spectrosc.*, 93, 248
- Lafont, S., Lucas, R., Omont, A. 1982, *A&A*, 106, 2, 201-213
- Lapinov, A. V., Golubiatnikov, G. Y., Markov, V. N., & Guarnieri, A. 2007, *Astronomy Letters*, 33, 121
- Langer, W. D., Graedel, T. E., Frerking, M. A., & Armentrout, P. B. 1984, *ApJ*, 277, 581
- Langer, W. D. & Penzias, A. A. 1990, *ApJ*, 357, 477
- Langer, W. D., Velusamy, T., Kuiper, T. B. H., et al. 1997, *ApJ*, 480, L63, 233
- Le Bourlot, J., Le Petit, F., Pinto, C., Roueff, E., & Roy, F. 2012, *A&A*, 541, A76
- Le Bourlot, J., Pineau Des Forets, G., Roueff, E., & Flower, D. R. 1993, *A&A*, 267
- Le Bourlot, J., Pineau des Forets, G., Roueff, E., et al. 1995, *ApJ*, 449, 178
- Lees, R. M. & Baker, J. G. 1968, *J. Chem. Phys.*, 48, 5299
- Lees, R. M., Lovas, F. J., Kirchhoff, W. H., & Johnson, D. R. 1973, *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, 2, 205
- Le Petit, F., Nehmé, C., Le Bourlot, J., & Roueff, E. 2006, *ApJS*, 164, 506
- Lepp, S., & Dalgarno, A. 1988, *ApJ*, 324, 553
- Lefloch, B. & Lazareff, B. 1994, *A&A*, 289, 559
- Lequeux, J. *The Interstellar Medium*, with the collaboration of Edith Falgarone and Charles Ryter. Springer 2003
- Leurini, S., Parise, B., Schilke, P., Pety, J., & Rolfs, R. 2010, *A&A*, 511, A82
- Leurini, S., Rolfs, R., Thorwirth, S., et al. 2006, *A&A*, 454, L47
- Li, A., & Draine, B. T. 2001, *ApJ*, 554, 778
- Lique, F., Spielfiedel, A., & Cernicharo, J. 2006, *A&A*, 451, 1125
- Liszt, H. S., Lucas, R., & Pety, J. 2006, *A&A*, 448, 253
- Lis, D. C., Roueff, E., Gerin, M., et al. 2002, *ApJ*, 571, L55
- Lis, D. C., & Schilke, P. 2003, *ApJ*, 597, L145
- Liszt, H., Sonnentrucker, P., Cordiner, M., & Gerin, M. 2012, *ApJ*, 753, L28
- Liszt, H. S., Pety, J., Gerin, M., & Lucas, R. 2014, *A&A*, 564, A64
- Liu, S.-Y., Mehringer, D. M., & Snyder, L. E. 2001, *ApJ*, 552, 654
- London, R. 1978, *ApJ*, Part 1, 225, 405-416
- Lovas, F. J., Suenram, R. D., Ogata, T., & Yamamoto, S.

- 1992, *ApJ*, 399, 325
- Lucas, R., & Liszt, H. S. 2000, *A&A*, 358, 1069
- Lynds, B. T. 1962, *ApJ. Suppl. Ser.*, 7, 1.
- Maçôas, E. M. S., Khriachtchev, L., Pettersson, M., Faust, R., & Räsänen, M. 2004, *J. Chem. Phys.*, 121, 1331
- Maddalena, R. J., Morris, M., Moscowitz, J., Thaddeus, P. 1986, *ApJ*, 303, 375
- Mäder, H., Guarnieri, A., Doose, J., et al. 1996, *Journal of Molecular Spectroscopy*, 180, 183
- Maeda, A., Medvedev, I. R., Winnewisser, M., et al. 2008, *ApJS*, 176, 543
- Maeda, S., Taketsugu, T., & Morokuma, K. 2012, *J. Phys. Chem. Lett.*, 3, 1900
- Maeda, S., Taketsugu, T., Ohno, K., & Morokuma, K. 2015, *J. Am. Chem. Soc.*, 137, 3433
- Maiwald, F., Lewen, F., Ahrens, V., et al. 2000, *Journal of Molecular Spectroscopy*, 202, 166
- Maki, A. G. & Mellau, G. C. 2001, *Journal of Molecular Spectroscopy*, 206, 47
- Mangum, J. G. 1993, *PASP*, 105, 117
- Maluendes, S. A., McLean, A. D., Yamashita, K., & Herbst, E. 1993, *J. Chem. Phys.*, 99, 2812
- Marcelino, N. 2007, Ph.D. Thesis, Universidad de Granada, Spain
- Marcelino, N., Cernicharo, J., Agúndez, M., et al. 2007, *ApJ*, 665, L127
- Marcelino, N., Cernicharo, J., Roueff, E., Gerin, M., & Mauersberger, R. 2005, *ApJ*, 620, 308
- Marcelino, N., Cernicharo, J., Tercero, B., & Roueff, E. 2009, *ApJ*, 690, L27
- Marconi, A., Testi, L., Natta, A., & Walmsley, C. M. 1998, *A&A*, 330, 696
- Margulès, L., Lewen, F., Winnewisser, G., Botschwina, P., & Müller, H. S. P. 2003, *Physical Chemistry Chemical Physics (Incorporating Faraday Transactions)*, 5
- Martin-Drumel, M. A., Hindle, F., Mouret, G., Cuisset, A., & Cernicharo, J. 2015, *ApJ*, 799, 115
- Martín, S., Mauersberger, R., Martín-Pintado, J., Henkel, C., & García-Burillo, S. 2006, *ApJS*, 164, 450
- Mathis, J. S., Rumpl, W., Nordsieck, K. H. 1977, *ApJ*, Part 1, 217, 425-433
- Mazzotti, F. J., Raghunandan, R., Esmail, A. M., Tulej, M., & Maier, J. P. 2011, *J. Chem. Phys.*, 134, 164303
- Mbosei, L., Fayt, A., Dréan, P., & Cosléou, J. 2000, *Journal of Molecular Structure*, 517, 271
- McCarthy, M., Gottlieb, C., & Thaddeus, P. 1995, *J. Mol. Spectr.*, 173, 303
- McCaughrean, M. 1997, *Herbig-Haro Flows and the Birth of Stars*, IAU Symposium No. 182, Edited by Bo Reipurth and Claude Bertout. Kluwer Academic Publishers, 551-560
- McEwan, M. J., Scott, G. B. I., Adams, N. G., et al. 1999, *ApJ*, 513, 287
- McGuire, B. A., Carroll, P. B., Loomis, R. A., et al. 2013, *ApJ*, 774, 56
- McGuire, B. A., Carroll, P. B., Sanders, J. L., et al. 2014, *MNRAS*, 442, 2901
- Megeath, S. T., Gutermuth, R., Muzerolle, J., et al. 2012, *AJ*, 144, 192
- Meier, D. S., & Turner, J. L. 2005, *ApJ*, 618, 259
- Meier, D. S., & Turner, J. L. 2012, *ApJ*, 755, 104
- Melnick, G. J., Tolls, V., Goldsmith, P. F., et al. 2012, *ApJ*, 752, 26
- Mendoza, E., Lefloch, B., López-Sepulcre, A., et al. 2014, *MNRAS*, 445, 151
- Menten, K. M., Reid, M. J., Forbrich, J., & Brunthaler, A. 2007, *A&A*, 474, 515
- Menten, K. M., Wyrowski, F., Belloche, A., et al. 2011, *A&A*, 525, A77
- Merino, P., Švec, M., Martínez, J. I., et al. 2014, *Nat.*

Comm., 5

- ▶ Meyer, M. R., Flaherty, K., Levine, J. L. et al. 2008, “Star Formation in NGC 2023, NGC 2024, and Southern L1630”, Handbook of Star Forming Regions, ASP Conference Series, Vol. 4, Bo Reipurth, ed. 662
- ▶ Minissale, M., Moudens, A., Baouche, S., Chaabouni, H., & Dulieu, F. 2016, MNRAS, 458, 2953
- ▶ Mollaaghababa, R., Gottlieb, C. A., Vrtilek, J. M., & Thaddeus, P. 1991, ApJ, 368, L19
- ▶ Mount, B. J., Redshaw, M., & Myers, E. G. 2012, Phys. Rev. A, 85, 012519
- ▶ Muench, A., Getman, K., Hillenbrand, L., Preibisch, T. 2008, “Star Formation in the Orion Nebula I: Stellar Content”, Handbook of Star Forming Regions, ASP Conference Series, Vol. 4, Bo Reipurth, ed. 483
- ▶ Müller, H. S. P., Drouin, B. J., & Pearson, J. C. 2009, A&A, 506, 1487
- ▶ Müller, H. S. P., Farhoomand, J., Cohen, E. A., et al. 2000, Journal of Molecular Spectroscopy, 201, 1
- ▶ Müller, H. S. P., Gendriesch, R., Margulès, L., et al. 2000, Physical Chemistry Chemical Physics (Incorporating Faraday Transactions), 2
- ▶ Müller, H. S. P., Goicoechea, J. R., Cernicharo, J., et al. 2014, A&A, 569, L5
- ▶ Müller, H. S. P., Klaus, T., & Winnewisser, G. 2000, A&A, 357, L65
- ▶ Müller, H. S. P., Thorwirth, S., Roth, D. A., & Winnewisser, G. 2001, A&A, 370, L49
- ▶ Müller, H. S. P., Schlöder, F., Stutzki, J., & Winnewisser, G. 2005, J. Mol. Struct., 742, 215
- ▶ Nagy, Z., van der Tak, F. F. S., Ossenkopf, V., et al. 2013, A&A, 550, A96
- ▶ Nagy, Z., Choi, Y., Ossenkopf-Okada, V., et al. 2017, A&A, 599, A22
- ▶ Nagy, Z., Ossenkopf, V., Van der Tak, F. F. S., et al. 2015, A&A, 578, A124
- ▶ Nagy, Z., Van der Tak, F. F. S., Ossenkopf, V., et al. 2013, A&A, 550, A96
- ▶ Neufeld, D. A. et al. 2006, A&A, 454, L37
- ▶ Neufeld, D. A., Falgarone, E., Gerin, M., et al. 2012, A&A, 542, L6
- ▶ Neufeld, D. A., Gusdorf, A., Güsten, R., et al. 2014, ApJ, 781, 102
- ▶ Neufeld, D. A. & Wolfire, M. G. 2009, ApJ, 706, 1594
- ▶ Neumann, R. M. 1970, ApJ, 161, 779
- ▶ Noel, B., Joblin, C., Maillard, J. P. & Paumard, T. 2005, A&A, 436, 569
- ▶ Nolt, I. G., Radostitz, J. V., DiLonardo, G., et al. 1987, Journal of Molecular Spectroscopy, 125, 274
- ▶ Öberg, K. I., Bottinelli, S., Jørgensen, J. K., & van Dishoeck, E. F. 2010, ApJ, 716, 825
- ▶ O’Dell, C. R. 2001, Annu. Rev. A&A, 39, 99
- ▶ O’Dell, C. R., Muench, A., Smith, N., Zapata, L. 2008, “Star Formation in the Orion Nebula II: Gas, Dust, Proplyds and Outflows”, Handbook of Star Forming Regions, ASP Conference Series, Vol. 4, Bo Reipurth, ed. 544
- ▶ O’Dell, C. R. & Yusef-Zadeh, 2000, Astron. J. 120, 382
- ▶ Ohishi, M., Irvine, W. M., & Kaifu, N. 1992, in Astrochemistry of Cosmic Phenomena, ed. P. D. Singh, IAU Symp., 150, 171
- ▶ Okabayashi, T. & Tanimoto, M. 1993, J. Chem. Phys., 99, 3268
- ▶ Olbert-Majkut, A., Ahokas, J., Lundell, J., & Pettersson, M. 2008, J. Chem. Phys., 129, 041101
- ▶ Orkisz, J. H., Pety, J., Gerin, M. 2017, A&A, 599, A99
- ▶ Ossenkopf, V., Röllig, M., Neufeld, D. A., et al. 2013, A&A, 550, A57
- ▶ Padovani, M., Walmsley, C. M., Tafalla, M., Galli, D., & Müller, H. S. P. 2009, A&A, 505, 1199
- ▶ Pardo, J. R., & Cernicharo, J. 2007, ApJ, 654, 978

- ▶ Pardo, J. R., Cernicharo, J., Goicoechea, J. R., Guélin, M., & Asensio Ramos, A. 2007, *ApJ*, 661, 250
- ▶ Pardo, J. R., Cernicharo, J., & Serabyn, E. 2001, *IEEE Trans. Antennas Propag.*, 49, 1683
- ▶ Pardo, J. R., Encrenaz, P. J., & Breton, D. 2001, in *Preserving the Astronomical Sky*, eds. R. J. Cohen, & W. T. Sullivan, *IAU Symp.*, 196, 255
- ▶ Parikka, A., Habart, E., Bernard-Salas, J., et al. 2017, *A&A*, 599, A20
- ▶ Parise, B., Leurini, S., Schilke, P., et al. 2009, *A&A*, 508, 737
- ▶ Parmar, P. S., Lacy, J. H., & Achtermann, J. M. 1991, *ApJ*, 372, L25
- ▶ Patel, D., Margolese, D., & Dyke, T. R. 1979, *J. Chem. Phys.*, 70, 2740
- ▶ Pavone, F. S., Zink, L. R., Prevedelli, M., Inguscio, M., & Fusina, L. 1990, *Journal of Molecular Spectroscopy*, 144, 45
- ▶ Pearson, E. F., Creswell, R. A., Winnewisser, M., & Winnewisser, G. 1976, *Zeitschrift Naturforschung Teil A*, 31, 1394
- ▶ Pearson, J. C., Drouin, B. J., Maestrini, A., et al. 2011, *Review of Scientific Instruments*, 82, 093105
- ▶ Pellegrini, E. W., Baldwin, J. A., Ferland, G. J., Shaw, G., & Heathcote, S. 2009, *ApJ*, 693, 285
- ▶ Peterson, K. A., Woods, R. C., Rosmus, P., & Werner, H.-J. 1990, *J. Chem. Phys.*, 93, 1889
- ▶ Pety, J., Gratier, P., Guzmán, V., et al. 2012, *A&A*, 548, A68
- ▶ Pety, J., & Rodríguez-Fernández, N. 2010, *A&A*, 517, A12
- ▶ Pety, J., Teyssier, D., Fossé, D., et al. 2005, *A&A*, 435, 885
- ▶ Pickett, H. M. 1991, *J. Mol. Spectrosc.*, 148, 371
- ▶ Pickett, H. M., Poynter, R. L., Cohen, E. A., et al. 1998, *JQSRT*, 60, 883
- ▶ Pilleri, P., Montillaud, J., Berné, O., & Joblin, C. 2012, *A&A*, 542, A69
- ▶ Pilleri, P., Treviño-Morales, S., Fuente, A., et al. 2013, *A&A*, 554, A87
- ▶ Pilleri, P., Fuente, A., Gerin, M., et al. 2014, *A&A*, 561, A69
- ▶ Pitts, W. M., Pasternack, L., & McDonald, J. R. 1982, *Chem. Phys.*, 68, 417
- ▶ Planck Collaboration. 2016, *A&A*, 586, A137
- ▶ Plummer, G. M., Anderson, T., Herbst, E., & de Lucia, F. C. 1986, *J. Chem. Phys.*, 84, 2427
- ▶ Powell, F. X. & Lide, Jr., D. R. 1964, *J. Chem. Phys.*, 41, 1413
- ▶ Preibisch, T., Hofmann, K.-H., Weigelt, G., et al. 1999, *New Astronomy*, 4, 7, 531-542
- ▶ Preusser, J. & Maki, A. G. 1993, *Journal of Molecular Spectroscopy*, 162, 484
- ▶ Rabli, D. & Flower, D. R. 2010, *MNRAS*, 406, 95
- ▶ Raga, A. C., Cantó, J. & Rodríguez, L. F. 2012, *Mon. Not. R. Astron. Soc.* 419, L39
- ▶ Raymonda, J. W., Muentner, J. S., & Klemperer, W. A. 1970, *J. Chem. Phys.*, 52, 3458
- ▶ Remijan, A. J., Hollis, J. M., Snyder, L. E., Jewell, P. R., & Lovas, F. J. 2006, *ApJ*, 643, L37
- ▶ Requena-Torres, M. A., Martín-Pintado, J., Rodríguez-Franco, A., et al. 2006, *A&A*, 455, 971
- ▶ Reynolds, R. J., Ogden, P. M. 1979, *ApJ*, Part 1, 229, 942-953
- ▶ Rimmer, P. B., Herbst, E., Morata, O., Roueff, E. 2012, *A&A*, 537, A7
- ▶ Roberge, W. G. & Draine, B. T. 1990, *ApJ*, 350, 700
- ▶ Röllig, M., Abel, N. P., Bell, T., et al. 2007, *A&A*, 467, 187
- ▶ Rosenblum, B., Nethercot, A. H., & Townes, C. H. 1958, *Physical Review*, 109, 400

- ▶ Roueff, E., Parise, B., & Herbst, E. 2007, *A&A*, 464, 245
- ▶ Ryan, W. L., & Levy, D. H. 2001, *J. Am. Chem. Soc.*, 123, 961
- ▶ Saito, S. 1972, *ApJ*, 178, L95
- ▶ Sakai, N., Saruwatari, O., Sakai, T., Takano, S., & Yamamoto, S. 2010, *A&A*, 512, A31
- ▶ Saleck, A. H., Eigler, K., Simon, R., Vowinkel, B., & Winnewisser, G. 1992, in *Astronomische Gesellschaft Abstract Series 7*, ed. G. Klare, 83
- ▶ Saleck, A. H., Tanimoto, M., Belov, S. P., Klaus, T., & Winnewisser, G. 1995, *Journal of Molecular Spectroscopy*, 171, 481
- ▶ Saleck, A. H., Simon, R., Winnewisser, G., & Wouterloot, J. G. A. 1994, *Canad. J. Phys.*, 72, 747
- ▶ Salgado, F., Berné, O., Adams, J. D., et al. 2016, *ApJ*, 830, 118
- ▶ Sandstrom, K. M., Peek, J. E. G., Bower, G. C., et al. 2007, *ApJ*, 667, 1161
- ▶ Sanz, M. E., McCarthy, M. C., & Thaddeus, P. 2003, *J. Chem. Phys.*, 119, 11715
- ▶ Sastry, K. V. L. N., Lees, R. M., & Van der Linde, J. 1981, *Journal of Molecular Spectroscopy*, 88, 228
- ▶ Savage, C., Apponi, A. J., & Ziurys, L. M. 2004, *ApJ*, 608, L73
- ▶ Saykally, R. J., Szanto, P. G., Anderson, T. G., & Woods, R. C. 1976, *ApJ*, 204, L143
- ▶ Schaerer, D., de Koter, A. 1997, *A&A*, 322, 598-614
- ▶ Schilke, P., Neufeld, D. A., Müller, H. S. P., et al. 2014, *A&A*, 566, A29
- ▶ Schilke, P., Pineau des Forêts, G., Walmsley, C. M., & Martín-Pintado, J. 2001, *A&A*, 372, 291
- ▶ Senekowitsch, J., Werne, H.-J., Rosmus, P., Reinsch, A., & Oneil, S. V. 1985, *J. Chem. Phys.*, 83, 4661
- ▶ Senent, M. L., & Hochlaf, M. 2010, *ApJ*, 708, 1452
- ▶ Sheehan, S. M., Parsons, B. F., Zhou, J., et al. 2008, *J. Chem. Phys.*, 128, 034301
- ▶ Simecková, M., Urban, S., Fuchs, U., et al. 2004, *Journal of Molecular Spectroscopy*, 226, 123
- ▶ Simón-Díaz, S., García-Rojas, J., Esteban, C., 2011, *A&A*, 530, A57
- ▶ Simon, R., Stutzki, J., Sternberg, A., & Winnewisser, G. 1997, *A&A*, 327, L9
- ▶ Smith, M. A., Schlemmer, S., von Richthofen, J., & Gerlich, D. 2002, *ApJ*, 578, L87
- ▶ Snyder, L. E., Buhl, D., Zuckerman, B., & Palmer, P. 1969, *Physical Review Letters*, 22, 679
- ▶ Sobolev, V. V. 1960, *Moving envelopes of stars* (Cambridge: Harvard University Press)
- ▶ Spielfiedel, A., Feautrier, N., Najjar, F., et al. 2012, *MNRAS*, 421, 1891
- ▶ Spitzer, L. *Physical Processes in the Interstellar Medium* (Wiley, 1978)
- ▶ Stahl, O., Wade, G., Petit, V., Stober, B., Schanne, L. 2008, *A&A*, 487, 1, 2008, 323-327
- ▶ Stassun, K. G., Mathieu, R. D., Valenti, J. A. 2006, *Nature*, 440, 7082, 311-314
- ▶ Stäuber, P., Benz, A. O., Jørgensen, J. K., et al. 2007, *A&A*, 466, 977
- ▶ Stecher, T. P., Williams, D. A., 1976, *ApJ*, 149, L29
- ▶ Sternberg, A., & Dalgarno, A. 1995, *ApJS*, 99, 565
- ▶ Stoerzer, H., Stutzki, J., & Sternberg, A. 1995, *A&A*, 296, L9
- ▶ Störzer, H. & Hollenbach, D. J. 1998, *ApJ*, 495, 853
- ▶ Su, H., He, Y., Kong, F., Fang, W., & Liu, R. 2000, *J. Chem. Phys.*, 113, 1891
- ▶ Sugarman, B. 1943, *Proc. Phys. Soc.*, 55, 429
- ▶ Tafalla, M., Santiago-García, J., Myers, P. C., et al. 2006, *A&A*, 455, 577

- ▶ Takahashi, T., Tokailin, H., Sagawa, T. 1985, *Physical Review B (Condensed Matter)*, 32, 12, 8317-8324
- ▶ Tanaka, K., Tanaka, T., & Suzuki, I. 1985, *J. Chem. Phys.*, 82, 2835
- ▶ Tarroni, R., & Carter, S. 2003, *J. Chem. Phys.*, 119, 12878
- ▶ Tercero, B., Cernicharo, J., López, A., et al. 2015, *A&A*, 582, L1
- ▶ Tercero, B., Cernicharo, J., Pardo, J. R., & Goicoechea, J. R. 2010, *A&A*, 517, A96
- ▶ Tercero, B., Kleiner, I., Cernicharo, J., et al. 2013, *ApJ*, 770, L13
- ▶ Teyssier, D., Fossé, D., Gerin, M., et al. 2004, *A&A*, 417, 135
- ▶ Teyssier, D., Hily-Blant, P., Gerin, M., et al. 2005, in *ESA SP 577*, ed. A. Wilson, 423
- ▶ Thaddeus, P., Gottlieb, C. A., Hjalmarsen, A., et al. 1985a, *ApJ*, 294, L49
- ▶ Thaddeus, P., Vrtilik, J. M., & Gottlieb, C. A. 1985b, *ApJ*, 299, L63
- ▶ Thomson, R. & Dalby, F. W. 1968, *Canadian Journal of Physics*, 46, 2815
- ▶ Thompson, J. K., Rainville, S., & Pritchard, D. E. 2004, *Nature*, 430, 58
- ▶ Thorwirth, S., Müller, H. S. P., Lewen, F., Gendriesch, R., & Winnewisser, G. 2000, *A&A*, 363, L37
- ▶ Thorwirth, S., Müller, H. S. P., & Winnewisser, G. 2000, *Journal of Molecular Spectroscopy*, 204, 133
- ▶ Tielens, A. G. G. M. *The Physics and Chemistry of the Interstellar Medium*, by A. G. G. M. Tielens, pp. . ISBN 0521826349. Cambridge, UK: Cambridge University Press, 2005
- ▶ Tielens, A. G. G. M. & Hollenbach, D. 1985a, *ApJ*, 291, 747
- ▶ Tielens, A. G. G. M. & Hollenbach, D. 1985b, *ApJ*, 291, 722
- ▶ Tielens, A. G. G. M., Meixner, M. M., van der Werf, P. P., et al. 1993, *Science*, 262, 86
- ▶ Tiemann, E. 1974, *Journal of Molecular Spectroscopy*, 51, 316
- ▶ Tiemann, E. 1982, *Journal of Molecular Spectroscopy*, 91, 60
- ▶ Tinti, F., Bizzocchi, L., Degli Esposti, C., & Dore, L. 2007, *ApJ*, 669, L113
- ▶ Törring, T. 1968, *Zeitschrift Naturforschung Teil A*, 23, 777
- ▶ Tremblin, P., Audit, E., Minier, V., et al. 2012, *A&A*, 546, A33
- ▶ Tremblin, P., Schneider, N., Minier, V., et al. 2014, *A&A*, 564, A106
- ▶ Treviño-Morales, S. P., Pilleri, P., Fuente, A., et al. 2014, *A&A*, 569, A19
- ▶ Tucker, K. D., Kutner, M. L., & Thaddeus, P. 1974, *ApJ*, 193, L115
- ▶ Turner, B. E. 1971, *ApJ*, 163, L35
- ▶ Turner, B. E. 1996, *ApJ*, 468, 694
- ▶ Turner, B. E., Herbst, E., & Terzieva, R. 2000, *ApJS*, 126, 427
- ▶ van der Tak, F. F. S., Black, J. H., Schöier, F. L., Jansen, D. J., & van Dishoeck, E. F. 2007, *A&A*, 468, 627
- ▶ van der Tak, F. F. S., Müller, H. S. P., Harding, M. E., & Gauss, J. 2009, *A&A*, 507, 347
- ▶ van der Tak, F. F. S., Nagy, Z., Ossenkopf, V., et al. 2013, *A&A*, 560, A95
- ▶ van der Tak, F. F. S., Ossenkopf, V., Nagy, Z., et al. 2012, *A&A*, 537, L10
- ▶ van der Werf, P. P., Stutzki, J., Sternberg, A., & Krabbe, A. 1996, *A&A*, 313, 633
- ▶ van der Werf, P. P., Goss, W. M., & O'Dell, C. R. 2013, *ApJ*, 762, 101
- ▶ van der Wiel, M. H. D., van der Tak, F. F. S., Ossenkopf,

- V., et al. 2009, *A&A*, 498, 161
- ▶ van Dishoeck, E. F., & Black, J. H. 1982, *ApJ*, 258, 533
 - ▶ van Dishoeck, E. F., & Black, J. H. 1988, *ApJ*, 334, 771
 - ▶ van Dishoeck, E. F., Blake, G. A., Jansen, D. J., & Groesbeck, T. D. 1995, *ApJ*, 447, 760
 - ▶ van Dishoeck, E. F., Jonkheid, B., & van Hemert, M. C. 2006, *Faraday Discussions*, 133, 231
 - ▶ Varberg, T. D. & Evenson, K. M. 1992, *ApJ*, 385, 763
 - ▶ Varberg, T. D., Stroh, F., & Evenson, K. M. 1999, *Journal of Molecular Spectroscopy*, 196, 5
 - ▶ Viswanathan, R. & Dyke, T. R. 1984, *Journal of Molecular Spectroscopy*, 103, 231
 - ▶ Vrtilek, J. M., Gottlieb, C. A., Langer, W. D., Thaddeus, P., & Wilson, R. W. 1985, *ApJ*, 296, L35
 - ▶ Vrtilek, J. M., Gottlieb, C. A., & Thaddeus, P. 1987, *ApJ*, 314, 716
 - ▶ Vrtilek, J. M., Gottlieb, A., Gottlieb, E. W., Killian, T. C., & Thaddeus, P. 1990, *ApJ*, 364, L53
 - ▶ Wakelam, V., Herbst, E., Loison, J.-C., et al. 2012, *ApJS*, 199, 21
 - ▶ Walmsley, C. M., Natta, A., Oliva, E., & Testi, L. 2000, *A&A*, 364, 301
 - ▶ Walter, F. M., Sherry, W. H., Wolk, S. J., Adams, N. R. 2008, “The σ Orionis Cluster”, *Handbook of Star Forming Regions*, ASP Conference Series, Vol. 4, Bo Reipurth, ed. 732
 - ▶ Walter, F. M., Wolk, S. J., Freyberg, M., Schmitt, J. H. M. M. 1997, *Memorie della Società Astronomia Italiana*, 8, 1081
 - ▶ Warren, W. H., Jr., Hesser, J. E. 1977, *ApJ Suppl. Ser.*, 34, 207 - 231
 - ▶ Warren, W. H., Jr., Hesser, J. E. 1978, *ApJ Supplement Series*, 36, 497-572
 - ▶ Watson, W. D. 1972, *ApJ*, 176, 103
 - ▶ Weilbacher, P. M., Monreal-Ibero, A., Kollatschny, W., et al. 2015, *A&A*, 582, A114
 - ▶ Werner, H.-J., Knowles, P. J., Knizia, G., Manby, F. R., & Schütz, M. 2012, *Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science*, 2, 242
 - ▶ Wernli, M., Wiesenfeld, L., Faure, A., & Valiron, P. 2007, *A&A*, 464, 1147
 - ▶ Willacy, K., Langer, W. D., 2000, *ApJ*, 544, 2, 903-920
 - ▶ Wilson, T. L., & Rood, R. 1994, *ARA&A*, 32, 191
 - ▶ Winnewisser, G., Belov, S. P., Klaus, T., & Schieder, R. 1997, *Journal of Molecular Spectroscopy*, 184, 468
 - ▶ Winnewisser, G. & Cook, R. L. 1968, *Journal of Molecular Spectroscopy*, 28, 266
 - ▶ Winnewisser, M., Sastry, K. V. L. N., Cook, R. L., & Gordy, W. 1964, *J. Chem. Phys.*, 41, 1687
 - ▶ Winnewisser, M., Winnewisser, B. P., Stein, M., et al. 2002, *J. Mol. Spectrosc.*, 216, 259
 - ▶ Winnewisser, M., Winnewisser, B. P., & Winnewisser, G. 1985, in *NATO Advanced Science Institutes (ASI) Series C*, Vol. 157, NATO Advanced Science Institutes (ASI) Series C, ed. G. H. F. Diercksen, W. F. Huebner, & P. W. Langhoff, 375–402
 - ▶ Woon, D. E. 1995, *Chem. Phys. Lett.*, 244, 45
 - ▶ Wootten, A., Bozayan, E. P., Garrett, D. B., Loren, R. B., & Snell, R. L. 1980, *ApJ*, 239, 844
 - ▶ Wyrowski, F., Schilke, P., Hofner, P. & Walmsley, C. M. 1997, *ApJ*, 487, L171
 - ▶ Xu, L.-H., Fisher, J., Lees, R. M., et al. 2008, *Journal of Molecular Spectroscopy*, 251, 305
 - ▶ Yamada, K. M. T., Moravec, A., & Winnewisser, G. 1995, *Zeitschrift Naturforschung Teil A*, 50, 1179
 - ▶ Yamaguchi, Y., Richards, Jr., C. A., & Schaefer, III, H. F. 1994, *J. Chem. Phys.*, 101, 8945
 - ▶ Yamamoto, S., & Saito, S. 1994, *J. Chem. Phys.*, 101, 5484
 - ▶ Yamamoto, S., Saito, S., Guelin, M., et al. 1987a, *ApJ*,

323, L149

► Yamamoto, S., Saito, S., Ohishi, M., et al. 1987b, *ApJ*, 322, L55

► Young Owl, R. C., Meixner, M. M., Wolfire, M., Tielens, A. G. G. M., & Tauber, J. 2000, *ApJ*, 540, 886

► Zanchet, A., Agúndez, M., Herrero, V. J., Aguado, A., & Roncero, O. 2013, *AJ*, 146, 125

► Ziurys, L. M. & McGonagle, D. 1993, *ApJS*, 89, 155

► Zubko, V., Dwek, E., Arendt, R. G. 2004, *ApJ Supplement Series*, 152, 2, 211-249.

► Zuckerman, B., Ball, J. A., & Gottlieb, C. A. 1971, *ApJ*, 163, L41